

DANIEL GIRARDI

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA:
COMPORTAMENTO
DINÂMICO DO ALGORITMO
DE NIEDERMAYER E
COMPORTAMENTO CRÍTICO
DE SISTEMAS APERIÓDICOS.**

FLORIANÓPOLIS – SC

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM FÍSICA**

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA: COMPORTAMENTO
DINÂMICO DO ALGORITMO DE
NIEDERMAYER E COMPORTAMENTO
CRÍTICO DE SISTEMAS APERIÓDICOS.**

Tese submetida à
Universidade Federal de Santa Catarina
como parte dos requisitos para a
obtenção do grau de Doutor em Física

DANIEL GIRARDI

Florianópolis – SC,

Dedico esta tese a minha mãe, cujo exemplo de honestidade, trabalho e vida tem sido um norteador para a minha vida. Mãe, obrigado por tudo que fez e ainda faz por mim. Tenho uma dívida eterna de gratidão.

*“Eu não adivinho.
Como cientista eu chego a conclusões
baseadas em observação e experimentação.”*
Dr. Sheldon Cooper

RESUMO

Este trabalho divide-se em duas partes. Na primeira, nós calculamos o expoente dinâmico do algoritmo de Niedermayer aplicado aos modelos de Ising e XY em duas dimensões, para vários valores do parâmetro E_0 (o qual, resumidamente, controla o tamanho médio das ilhas a serem modificadas). Para $E_0 = -1$ nós reobtemos o algoritmo de Metropolis e para $E_0 = 1$ reobtemos o algoritmo de Wolff. Para $-1 < E_0 < 1$, nós mostramos que o tamanho médio das ilhas inicialmente cresce com o tamanho linear do sistema, L , mas eventualmente satura em um determinado tamanho \tilde{L} , que depende de E_0 . Para $L > \tilde{L}$ o algoritmo de Niedermayer se comporta como o algoritmo de Metropolis, isto é, tem o mesmo expoente dinâmico. Para $E_0 > 1$, os tempos de auto-correlação são sempre maiores que para $E_0 = 1$ (Wolff) e, mais importante, sempre crescem mais rápido que uma lei de potência de L . Portanto, mostramos que a melhor escolha do parâmetro E_0 é o que retoma o algoritmo de Wolff. Nós também obtemos o comportamento dinâmico do algoritmo de Wolff; apesar de não conclusivo, propusemos uma lei de escala para o tempo de auto-correlação.

Na segunda parte nós estudamos o modelo de Potts numa rede retangular com modulações aperiódicas nas interações ao longo de uma direção. Os resultados numéricos foram obtidos utilizando o algoritmo de Wolff para diferentes tamanhos de redes, permitindo que o método de escala de tamanho finito fosse utilizado. Foram utilizadas 3 sequências aperiódicas autoduais, as quais permitem resultados mais precisos, uma vez que a temperatura crítica pode ser conhecida exatamente. Nós analisamos 3 modelos, com seis, oito e quinze estados, todos com transições de primeira ordem no sistema uniforme. Mostramos que o critério de Harris-Luck, originalmente introduzido para o estudo de transições contínuas, é obedecido também para transições de primeira ordem. Nossos resultados indicam que a nova classe de universalidade é dependente do número de estados do modelo de Potts. Como esperado, observamos uma dependência log-periódica da magnetização e da susceptibilidade com o tamanho do sistema finito.

ABSTRACT

This work is divided into two main parts. In the first one we calculate the dynamic critical exponent for the Niedermayer algorithm applied to the two-dimensional Ising and XY models, for various values of the free parameter E_0 . For $E_0 = -1$ we regain the Metropolis algorithm and for $E_0 = 1$ we regain the Wolff algorithm. For $-1 < E_0 < 1$, we show that the mean size of the clusters of (possibly) turned spins initially grows with the linear size of the lattice, L , but eventually saturates at a given lattice size \tilde{L} , which depends on E_0 . For $L > \tilde{L}$, the Niedermayer algorithm is equivalent to the Metropolis one, i.e, they have the same dynamic exponent. For $E_0 > 1$, the autocorrelation time is always greater than for $E_0 = 1$ (Wolff) and, more important, it also grows faster than a power of L . Therefore, we show that the best choice of cluster algorithm is the Wolff one, when compared to the Niedermayer generalization. We also obtain the dynamic behavior of the Wolff algorithm: although not conclusive, we propose a scaling law for the dependence of the autocorrelation time on L .

In the second part we study the Potts model on a rectangular lattice with aperiodic modulations in its interactions along one direction. The numerical results are obtained using the Wolff algorithm and for many lattice sizes, allowing for a finite-size scaling analysis to be carried out. Three different self-dual aperiodic sequences are employed, which leads to more precise results, since the exact critical temperature is known. We analyze three models, with six, eight and fifteen number of states: all present first-order transitions on their uniform versions. We show that the Harris-Luck criterion, originally introduced for the study of continuous transitions, is obeyed also for first-order ones. We show that the new universality class that emerges for relevant aperiodic modulations is dependent on the number of states of the Potts model, the same result obtained for random disorder. Also, we observe a log-periodic dependence of the magnetization and susceptibility with linear size (L).

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	p. 1
2	ALGORITMO DE NIEDERMAYER	p. 5
2.1	Introdução	p. 5
2.2	Algoritmo de Niedermayer e Balanço Detalhado	p. 6
2.3	Função de correlação e expoente crítico dinâmico . . .	p. 10
2.4	Resultados	p. 15
2.4.1	Modelo de Ising	p. 15
2.4.2	Modelo XY	p. 27
2.5	Conclusões e Perspectivas	p. 32
3	COMPORTAMENTO CRÍTICO DE SISTEMAS APER- IÓDICOS.....	p. 35
3.1	Modelo de Potts	p. 35
3.2	Transições de fase e comportamento crítico	p. 36
3.3	Seqüências aperiódicas	p. 39
3.3.1	Criação de seqüências aperiódicas	p. 39
3.3.2	Critério de Harris-Luck	p. 40
3.4	Escala de tamanho finito	p. 41
3.5	Determinação da ordem da transição	p. 43
3.6	Resultados	p. 47
3.6.1	Determinação de T_c	p. 47
3.6.2	Determinação da ordem da transição	p. 49
3.6.3	Cálculo dos expoentes críticos	p. 52
3.7	Conclusões e perspectivas	p. 60

LISTA DE FIGURAS

2.1	Ilustração de como é criada uma ilha no algoritmo de Wolff para o modelo de Ising. Após ser criada a ilha, todos os sítios da mesma são invertidos.	p. 6
2.2	Gráfico da função de correlação da magnetização do modelo de Ising de uma rede de tamanho linear $L = 128$ utilizando o algoritmo de Wolff.	p. 12
2.3	Gráfico semi-log da função de correlação da energia para uma rede quadrada 256×256 do modelo de Ising utilizando o algoritmo de Wolff. Em azul é apresentado o tempo de correlação calculado através do método integral e em vermelho pelo método do ajuste linear. Os índices <i>int</i> e <i>incl</i> se referem a τ medido pelo método integral e pelo método de ajuste linear, respectivamente.	p. 13
2.4	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -0,9$	p. 15
2.5	Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = -0,9$	p. 16
2.6	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -0,5$	p. 16
2.7	Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = -0,5$	p. 17
2.8	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,0$	p. 17
2.9	Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = 0,0$	p. 18
2.10	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,3$	p. 19
2.11	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,5$	p. 19
2.12	Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = 0,3$	p. 19
2.13	Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 0,5$	p. 20
2.14	Gráfico semi-log das funções de correlação da magnetização e da energia, para $L = 8$ e $E_0 = 0,3$	p. 20

2.15	Gráfico semi-log das funções de correlação da magnetização e da energia, para $L = 128$ e $E_0 = 0,3$	p. 21
2.16	Gráfico log-log de τ em função de L da energia (quadrado) e da magnetização (círculo), para $E_0 = 0,9$	p. 22
2.17	Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 0,9$	p. 22
2.18	Gráfico log-log de τ em função de L da energia (quadrado) e da magnetização (círculo), para $E_0 = 1,0$. A curva vermelha é uma tentativa de ajuste do tipo lei de potência e em azul um ajuste do tipo logarítmico.	p. 23
2.19	Gráfico log-log de τ em função de L , para a energia para $E_0 = 1,0$. A curva vermelha é uma tentativa de ajuste do tipo correção de escala e em azul um ajuste do tipo potência do logaritmo.	p. 25
2.20	Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = 1,0$	p. 26
2.21	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 1,1$	p. 27
2.22	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 1,02$	p. 28
2.23	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -1,0$ (algoritmo de Metropolis).	p. 29
2.24	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -0,5$	p. 30
2.25	Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,0$	p. 31
2.26	Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = -0,5$	p. 31
2.27	Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 0,0$	p. 32
2.28	Gráfico log-log de τ em função de L da energia (quadrado) e da magnetização (círculo), para $E_0 = 1,0$. A curva vermelha é o ajuste proposto na Eq. 2.22, os parâmetros ajustados são apresentados na própria figura.	p. 33
2.29	Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 1,0$	p. 33
3.1	Valor de q_c como função de d obtido através de cálculos de grupo de renormalização variacional. Figura extraída de (Nienhuis, Riedel e Schick 1981).	p. 37
3.2	Representação das transições de primeira ordem (curva azul) e contínua (curva vermelha).	p. 38

3.3	Distribuição de probabilidade para a energia interna em várias temperaturas obtidas na simulação do modelo de Potts na rede quadrada em duas dimensões. a) Resultado para uma rede de 34×34 a uma temperatura longe da temperatura crítica. b) O mesmo que a figura a), porém a uma temperatura muito próxima da temperatura crítica. c) Desigualdade da distribuição para uma rede 50×50 próximo da temperatura crítica. . . .	p. 45
3.4	Esquema de como as interações aperiódicas são introduzidas na rede. Linhas tracejadas (cheias) representam interações J_A (J_B).	p. 47
3.5	Esquema de como é feita a transformação de dualidade.	p. 49
3.6	Gráfico da barreira de energia ΔF em função do inverso do tamanho de rede ($1/L$). O sistema homogêneo é uma rede retangular $2L \times L$ e as sequências aperiódicas têm $r = 0,9$ com $q = 6$	p. 50
3.7	Gráficos da distribuição de probabilidade para a sequência a) Paper-Folding e b) Thue-Morse com diferentes tamanhos de rede L e simuladas em $T_c(L)$	p. 51
3.8	Gráfico da barreira de energia ΔF em função do inverso do tamanho de rede ($1/L$) para a sequência Thue-Morse com $r = 0,7$ e $0,9$ e $q = 6$	p. 52
3.9	Gráfico log-log de τ em função de L para a sequência Paper-folding com $q = 6$ e $r = 0,1$	p. 54
3.10	Gráfico log-log da a) magnetização e b) susceptibilidade em função de pL para as sequências Thue-Morse (TM), Paper-folding (PF) e Three-folding (TF), com $q = 6$ e $r = 0,1$. As linhas cheias correspondem aos ajustes do tipo lei de potência e a linha pontilhada apenas conecta os pontos da sequência TM.	p. 55
3.11	Gráfico semi-log das relações dos expoentes críticos em função de $1/pL_{min}$ (a) para as 3 sequências estudadas com $q = 6$ e $r = 0,1$. Os gráficos (b) e (c) são ampliações sobre os expoentes γ/ν e β/ν , respectivamente.	p. 57
3.12	Gráficos da relação dos expoentes β/ν em função de $1/pL$ para a sequência Paper-Folding com $r = 0,1, 0,01$ e $0,001$, variando de cima para baixo e com dois valores de q . Em todos os gráficos as escalas nos eixos x e y são as mesmas.	p. 58

3.13	Gráficos da relação dos expoentes γ/ν em função de $1/pL$ para a sequência Paper-Folding com $r = 0, 1, 0, 01$ e $0, 001$, variando de cima para baixo e com dois valores de q . Em todos os gráficos as escalas nos eixos x e y são as mesmas.	p. 58
1	Exemplo de como é feita a mudança de direção de um determinado sítio. \vec{s}_i é o estado antigo do spin i , \vec{s}'_i é seu novo estado e \hat{n} é a direção sorteada	p. 70

LISTA DE TABELAS

3.1	Algumas grandezas termodinâmicas e seus respectivos expoentes críticos.	p. 38
3.2	Principais grandezas termodinâmicas e suas relações com o tamanho da rede simulada, na temperatura crítica do sistema infinito.	p. 43
3.3	Sequências aperiódicas utilizadas com as suas regras de substituição e o expoente de flutuação ω . L_{max} é o maior tamanho de rede simulado.	p. 48
3.4	Relação entre os expoentes críticos para as duas sequências relevantes. Para a sequência Paper-Folding só foram levados em conta os valores de $pL > 16$. O número em parêntese representa o erro na última casa.	p. 56
3.5	Expoentes críticos para as duas sequências relevantes, calculados através da média de $\Theta(L)$ para todos os valores de r simulados. Os números em parênteses representam o erro na última casa.	p. 60

1 INTRODUÇÃO

Simulações numéricas têm sido muito usadas para estudar sistemas físicos, especialmente na última década. A Mecânica Estatística, entre outras áreas, tem se beneficiado muito desta técnica. Em particular, os métodos de Monte Carlo permitiram uma determinação precisa dos parâmetros termodinâmicos em muitos modelos, tanto clássicos como quânticos. Excelentes revisões destes métodos podem ser encontrados nas referências (Landau e Binder 2000) e (Newman e Barkema 1999).

Recentemente, este campo tem visto um rápido desenvolvimento de novos algoritmos, que visam fazer as simulações mais eficientes, em tempo e em economia de memória, e também aplicáveis a sistemas complexos. Como exemplo destes desenvolvimentos nós podemos citar: o cálculo da densidade de estados através do método do histograma plano, que permite obter informações em qualquer temperatura através de uma única simulação, independente da temperatura (Wang e Landau 2001); o uso das operações e armazenamento de bits, os quais aumentam muito a velocidade das operações e economizam substancialmente a memória (Oliveira 1991); e a introdução de algoritmos de ilha, os quais atualizam um conjunto de sítios, diminuindo o tempo de auto-correlação e quase eliminando o efeito de *ralentamento crítico* (“critical slowing down”) (Landau e Binder 2000, Newman e Barkema 1999, Swendsen e Wang 1987, Wolff 1989).

Na primeira parte deste trabalho iremos nos ater ao problema de *critical slowing down*. De fato este é um problema sério nas simulações de Monte Carlo, o qual faz com que as simulações de sistemas no, ou próximo do, ponto crítico sejam muito ineficientes. Este fenômeno é medido através do comportamento do tempo de auto-correlação, τ , com o tamanho linear do sistema, L , suposto ser da forma $\tau \sim L^z$, para pontos na região crítica. O algoritmo de Metropolis, por exemplo, quando aplicado ao modelo de Ising em duas dimensões, apresenta $z \sim 2,17$ (Nightingale e Blöte 1996). Algoritmos que atualizam ilhas de sítios (também chamados de algoritmos de ilha ou “cluster”) têm valores de z muito menores: este é o caso do algoritmo de Swendsen-Wang (Swendsen e Wang 1987) e Wolff (Wolff 1989), para os quais z é aproximadamente zero para o modelo de Ising em duas dimensões (Coddington e Baillie 1992).

Uma alternativa (e generalização) destes dois algoritmos de

ilha, o algoritmo de Niedermayer, foi introduzido há alguns anos (Niedermayer 1988) mas, até onde sabemos, nunca teve seu comportamento dinâmico estudado em detalhes. Na primeira parte deste trabalho nós calcularemos o expoente dinâmico deste algoritmo, aplicado aos modelos de Ising e XY , para alguns valores de E_0 (veja adiante), para determinar qual a melhor escolha para este parâmetro (ou seja, o valor de E_0 que minimiza z).

Na segunda parte, nós estudamos sistemas com modulações aperiódicas. Sistemas não-uniformes são comuns na natureza; a não-uniformidade pode ser consequência de uma desordem aleatória ou de uma construção determinística do material de dois diferentes átomos, por exemplo. Experimentalmente, existem diversas técnicas de crescimento de superfície (Ross 1994, Shchukin e Bimberg 1999, Jr e Davison 1990) que permitem controlar a forma das camadas para seguir, por exemplo, uma sequência aperiódica. Uma das principais questões teóricas é até que ponto a introdução de não-uniformidades afeta o comportamento crítico de um sistema, quando comparado com o sistema uniforme. Para o caso de desordens aleatórias e transições contínuas no sistema uniforme, esta questão é parcialmente respondida pelo critério de Harris (Harris 1974). De acordo com este critério, o sistema aleatório terá o mesmo comportamento crítico do sistema uniforme se o expoente crítico do calor específico, α , for negativo. A desordem é dita *irrelevante* neste caso. Se α é positivo, os expoentes críticos do sistema aleatório são diferentes dos expoentes do sistema uniforme e a desordem é dita *relevante*. Para $\alpha = 0$ (o caso marginal), aparecem correções logarítmicas (Reis, Queiroz e Santos 1996). Uma generalização deste critério é disponível também para desordens correlacionadas de curto (Branco e Machado 1993, Branco, Queiroz e Santos 1990, Branco, Queiroz e Santos 1988) e longo (Branco, Queiroz e Santos 1988, Weinrib 1984) alcance. Quando a transição do modelo uniforme é de primeira ordem, o cenário é qualitativamente diferente: em duas dimensões, mesmo uma quantidade infinitesimal de desordem muda a natureza da transição para contínua (Aizenman e Wehr 1989, Hui e Berker 1989) enquanto em três dimensões uma quantidade finita de desordem é necessária para mudar a ordem da transição (Hui e Berker 1989).

Nós estamos principalmente interessados no comportamento crítico de modelos com modulações aperiódicas no(s) parâmetro(s) de

interação. Para o caso de transições contínuas no modelo uniforme, o critério de Harris-Luck determina quando a introdução de uma modulação aperiódica muda a classe de universalidade do modelo (Luck 1993). Esta mudança é determinada pelo expoente de cruzamento (“*crossover*”) Φ , dado por:

$$\Phi = 1 + d_a \nu(\omega - 1) \quad (1.1)$$

onde ω é o expoente que descreve o comportamento da flutuação geométrica da sequência, d_a é o número de dimensões onde a sequência aperiódica atua e ν é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação do sistema uniforme. Quando $\Phi > 0$ a sequência é relevante e quando $\Phi < 0$ a sequência é irrelevante.

Este critério funciona para transições contínuas no sistema original, mas resultados numéricos (Chatelain, Berche e Berche 1999, Berche, Chatelain e Berche 1998) indicam que também é verdadeiro mesmo quando o sistema uniforme apresenta uma transição de primeira ordem (se for este o caso, a introdução de modulações aperiódicas na constante de troca deverá nos fornecer um cenário totalmente diferente do obtido para desordem aleatória). Este resultado foi obtido através do estudo do modelo de Potts (Potts e Domb 1952) nas referências (Chatelain, Berche e Berche 1999) e (Berche, Chatelain e Berche 1998), onde uma variável dinâmica com q estados é atribuída a cada sítio de uma dada rede. Para q pequeno suficiente, a transição é contínua, enquanto é de primeira ordem para q acima de um dado q_c (em duas dimensões, $q_c = 4$). Para $q = 8$, o critério de Harris-Luck é obedecido e a ordem da transição muda para modulações aperiódicas relevantes (Chatelain, Berche e Berche 1999, Berche, Chatelain e Berche 1998).

Aqui, nós temos duas questões. A primeira é a possibilidade da nova classe de universalidade para modulações relevantes depender do número de estados do modelo de Potts, como é no caso de desordem aleatória (Cardy e Jacobsen 1997, Jacobsen e Cardy 1998). Nosso segundo objetivo é fornecer um teste independente do critério de Harris-Luck para transições de primeira ordem. Este teste será feito na segunda parte deste trabalho, utilizando o modelo de Potts com $q = 6$ e 15 estados.

2 ALGORITMO DE NIEDERMAYER

2.1 Introdução

Neste capítulo faremos um estudo detalhado do algoritmo de Niedermayer e seu comportamento para diferentes valores do parâmetro E_0 (a ser definido abaixo). O objetivo deste trabalho é encontrar o valor de E_0 que minimiza o expoente crítico dinâmico (z) e, assim, reduz o efeito de “*critical slowing down*”. Para avaliar o algoritmo iremos testá-lo no modelo de Ising e no modelo XY.

Uma classe de algoritmo que diminui o expoente crítico dinâmico é o chamado algoritmo de ilha. O que este algoritmo tem de especial é o fato de se construir uma “ilha” de sítios e obter uma nova configuração do sistema mudando o estado dos sítios pertencentes à ilha. Os algoritmos de ilhas mais famosos são o algoritmo de Swendsen-Wang (Swendsen e Wang 1987) e o algoritmo de Wolff (Wolff 1989). Outro algoritmo de ilha pouco conhecido é o algoritmo de Niedermayer (Niedermayer 1988), que de fato é uma generalização dos algoritmos de Wolff ou de Swendsen-Wang.

No algoritmo de Wolff, aplicado ao modelo de Ising, o processo de formação da ilha segue a seguinte regra. Um sítio é escolhido aleatoriamente, depois é observado um dos primeiros vizinhos; se este vizinho estiver no mesmo estado do primeiro sítio ele é adicionado à ilha com probabilidade:

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}, \quad (2.1)$$

onde β é $1/k_B T$, J é a constante de acoplamento ou energia de troca entre sítios e T é a temperatura. Este procedimento é repetido para todos os vizinhos do sítio escolhido e a cada novo sítio adicionado à ilha seus vizinhos também podem ser adicionados ao aglomerado, seguindo a mesma probabilidade. Um dado sítio pode ter mais de uma chance de ser adicionado a uma ilha, dependendo do número de sítios vizinhos no mesmo estado que ele. Após ser criada a ilha, todos os sítios têm seu estado alterado para um novo estado, como ilustrado na Fig. 2.1.

O algoritmo de Swendsen-Wang é muito similar ao algoritmo de Wolff. A diferença é que primeiro são criadas várias ilhas, de forma que todos os sítios da rede pertençam a alguma ilha. Depois os sítios nas ilhas são alterados com probabilidade $1/2$. Ambos os algoritmos obedecem o *balanço detalhado* e são ergódicos (Newman e Barkema 1999).

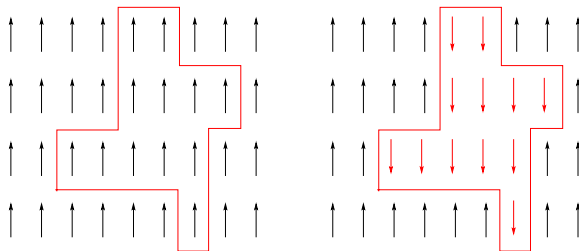


Figura 2.1: Ilustração de como é criada uma ilha no algoritmo de Wolff para o modelo de Ising. Após ser criada a ilha, todos os sítios da mesma são invertidos.

A grande vantagem destes dois algoritmos é que o expoente crítico dinâmico em duas dimensões é muito pequeno, se compararmos com o do algoritmo de Metropolis. De fato, na literatura não há um consenso se podemos descrever seu comportamento como uma lei de potência, pois quando $z \sim 0$ é muito difícil diferenciar um comportamento do tipo lei de potência de um comportamento logarítmico. Um dos objetivos deste trabalho é determinar se a generalização proposta por Niedermayer pode diminuir (ou mesmo eliminar) o “critical slowing down”, assim como contribuir para a discussão sobre o comportamento dinâmico do algoritmo de Wolff.

2.2 Algoritmo de Niedermayer e Balanço Detalhado

Outro algoritmo de ilha foi proposto por Ferenc Niedermayer em 1988 (Niedermayer 1988). Para o modelo de Ising o processo de formação da ilha é muito similar ao utilizado pelo algoritmo de Wolff. Primeiramente é escolhido um sítio aleatoriamente e para cada vizinho é feito um teste para ver se ele é adicionado à ilha ou não; para o modelo de Ising a probabilidade de adicionar um sítio à ilha é dada por:

$$P_{add}(E_{ij}) = \begin{cases} 1 - e^{K(E_{ij}-E_0)}, & \text{se } E_{ij} < E_0 \\ 0, & \text{se } E_{ij} \geq E_0 \end{cases} \quad (2.2)$$

onde $K = \beta J$, E_{ij} é a energia de interação entre os sítios ij , sendo -1 se $s_i = s_j$ e $+1$ se $s_i \neq s_j$ e E_0 é um parâmetro escolhido livremente. O teste é feito para todos os vizinhos de cada sítio adicionado à ilha.

Note que para $E_0 > 1$, sítios em estados diferentes também podem ser adicionados à ilha. Após formada a ilha, todos os sítios podem ter seu estado alterado segundo taxa de aceite:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-K \frac{\Delta E}{2} (1-E_0)}, & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{se } \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

onde ΔE é a variação de energia do sistema ao passar do antigo estado μ para o novo estado ν em unidades de J . Ou seja, se a energia do sistema diminuir ou permanecer constante o novo estado é sempre aceito; se não, ele pode ser aceito com a probabilidade descrita na Eq. 2.3. Se o novo estado não for aceito, todos os sítios permanecem no estado original. Note que, para $E_0 \geq 1$, $A(\mu \rightarrow \nu) \geq 1$ sempre.

Para provar que as Eqs. 2.2 e 2.3 satisfazem o balanço detalhado vamos partir da equação do balanço detalhado:

$$P(\nu) \cdot \omega(\nu \rightarrow \mu) = P(\mu) \cdot \omega(\mu \rightarrow \nu) \quad (2.4)$$

onde $P(\nu)$ é a probabilidade de encontrar o sistema na configuração qualquer ν e $\omega(\nu \rightarrow \mu)$ é a probabilidade do sistema sair da configuração ν e ir para uma configuração μ . Uma vez que a probabilidade de se encontrar o sistema numa dada configuração ν é dada pelo peso de Boltzmann ($\propto e^{-\beta E_\nu}$), obtemos então:

$$\frac{\omega(\nu \rightarrow \mu)}{\omega(\mu \rightarrow \nu)} = \frac{P(\mu)}{P(\nu)} = e^{-K(E_\mu - E_\nu)} \quad (2.5)$$

onde $K = \beta J$ e E_ν é a energia do sistema na configuração ν em unidades de J . Podemos definir a probabilidade de transição entre configurações como:

$$\omega(\nu \rightarrow \mu) = g(\nu \rightarrow \mu) \cdot A(\nu \rightarrow \mu) \quad (2.6)$$

onde $g(\nu \rightarrow \mu)$ é a probabilidade do nosso algoritmo, a partir da configuração ν , gerar a configuração μ e $A(\nu \rightarrow \mu)$ é a probabilidade com que essa mudança de configuração é permitida pelo algoritmo. Assim, reescrevemos a Eq. 2.5 como:

$$\frac{g(\nu \rightarrow \mu) \cdot A(\nu \rightarrow \mu)}{g(\mu \rightarrow \nu) \cdot A(\mu \rightarrow \nu)} = e^{-K \Delta E} \quad (2.7)$$

onde $\Delta E = E_\mu - E_\nu$.

A mudança de configuração está relacionada com a ilha formada. A probabilidade de formarmos uma ilha no sentido $\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu}$ é a mesma que no sentido $\boldsymbol{\mu} \rightarrow \mathbf{v}$, exceto pela contribuição dos sítios na fronteira da ilha. Na fronteira haverá sítios não adicionados à ilha que formam pares paralelos e anti-paralelos. Suponha que na direção $\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu}$ existam m pares de sítios paralelos e n pares de sítios anti-paralelos. Estes sítios não foram adicionados à ilha e a probabilidade disto acontecer é $[1 - P_{add}(-1)]^m [1 - P_{add}(+1)]^n$. Portanto, podemos ver que a probabilidade de uma dada ilha ser formada é:

$$g(\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu}) \propto [1 - P_{add}(-1)]^m [1 - P_{add}(+1)]^n \quad (2.8)$$

Substituindo a Eq. 2.8 em 2.7, temos que:

$$\frac{[1 - P_{add}(-1)]^m [1 - P_{add}(+1)]^n A(\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu})}{[1 - P_{add}(-1)]^n [1 - P_{add}(+1)]^m A(\boldsymbol{\mu} \rightarrow \mathbf{v})} = \left[\frac{1 - P_{add}(-1)}{1 - P_{add}(+1)} \right]^{m-n} \frac{A(\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu})}{A(\boldsymbol{\mu} \rightarrow \mathbf{v})} = e^{-\beta \Delta E} \quad (2.9)$$

Sabendo que no modelo de Ising $\Delta E = 2J(m - n)$ podemos reescrever a Eq. 2.9 como:

$$\frac{A(\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu})}{A(\boldsymbol{\mu} \rightarrow \mathbf{v})} = \left[e^{2\beta J} \frac{1 - P_{add}(-1)}{1 - P_{add}(+1)} \right]^{n-m}. \quad (2.10)$$

Substituindo a Eq. 2.2 em 2.10 e lembrando que, para o modelo de Ising, $E_{ij} = -1$ para sítios no mesmo estado e $E_{ij} = +1$ para sítios em estados diferentes, obtemos:

$$\frac{A(\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu})}{A(\boldsymbol{\mu} \rightarrow \mathbf{v})} = e^{K(1-E_0)(n-m)}. \quad (2.11)$$

que é exatamente a Eq. 2.3 escrita em termos de m e n e, para $E_0 \geq 1$, $A(\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu}) = 1$.

Podemos ver que é possível formar uma ilha contendo apenas um sítio e virá-la. Isso é suficiente para garantir que qualquer configuração do nosso sistema é acessível em um tempo finito e portanto o algoritmo é ergódico.

Também estudaremos o modelo XY, mas os detalhes do algoritmo aplicado a esse modelo são apresentados no apêndice A. Por questões práticas, iremos nos concentrar no modelo de Ising, cujo hamil-

toniano é dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \quad (2.12)$$

onde s_i é o estado do i -ésimo sítio e pode assumir os valores $+1$ e -1 e o símbolo $\langle ij \rangle$ significa que a soma é feita sobre todos os pares de primeiros vizinhos, ij , em uma rede cristalina. Então, quando os sítios estão no mesmo estado (paralelos), a energia da ligação (E_{ij}) tem o valor -1 , e, se estiverem em estados diferentes (anti-paralelos), a energia é $+1$.

Uma questão importante relacionada ao algoritmo de Niedermayer é: qual deve ser o valor de E_0 escolhido ao se realizar uma simulação, de modo a minimizar o “critical slowing down”? Vamos considerar a escolha $E_0 = +1$. Neste caso, a probabilidade de se adicionar um sítio à ilha é dada pela Eq. 2.1 para os sítios paralelos e 0 para os sítios anti-paralelos, e a taxa de aceite é igual a 1, ou seja, a ilha é sempre “virada”. Portanto, com $E_0 = +1$ o algoritmo de Niedermayer recai no algoritmo de Wolff.

Escolhendo $E_0 = -1$ vemos que nenhum vizinho é adicionado a ilha, já que a probabilidade de adição é sempre igual a 0. Portanto, a ilha é formada de um único sítio, que pode ser virado ou não, e a taxa de aceite é dada por:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-K\Delta E} & , \text{ se } \Delta E > 0 \\ 1 & , \text{ se } \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (2.13)$$

Essa é exatamente a taxa de aceite para o algoritmo de Metropolis. Assim, o comportamento do algoritmo de Niedermayer é o mesmo do algoritmo de Metropolis para $E_0 = -1$.

Esperamos que, se escolhermos um valor intermediário $-1 < E_0 < +1$, o comportamento do algoritmo deve passar gradativamente do de Metropolis para o de Wolff. É sabido que o parâmetro E_0 controla o tamanho médio da ilha formada, mas como isto se reflete no comportamento crítico dinâmico do algoritmo até então não foi estudado de forma sistemática. Iremos ainda explorar a região com $E_0 > 1$; neste caso, existe uma probabilidade de que sítios anti-paralelos também sejam adicionados à ilha, aumentando o tamanho médio da mesma, a qual é sempre “virada”, isto é, $A(\nu \rightarrow \mu) = 1$, $\forall \nu \text{ e } \mu$. Quando $E_0 = +\infty$, todos os sítios são adicionados à ilha e, portanto, o tempo de correlação se torna infinito, para qualquer tamanho de rede L .

Sabemos que o algoritmo de Metropolis é, na temperatura crítica, muito menos eficiente que o algoritmo de Wolff, ou seja, seu expoente crítico dinâmico é maior que o de Wolff. Portanto, o algoritmo de Niedermayer com $E_0 = -1$ é bem menos eficiente que com $E_0 = +1$. O objetivo deste trabalho é verificar se existe um valor de E_0 que deixe o algoritmo mais eficiente que no caso $E_0 = +1$, ou seja, que minimize o valor do expoente crítico dinâmico. Este valor pode estar entre $-1 < E_0 \leq 1$ ou mesmo ser maior que 1. No caso de ser maior que 1, sabemos que não pode ser muito maior, pois como foi dito, para $E_0 \rightarrow \infty$ todos os sítios são adicionados a ilha, onde o algoritmo nem mesmo é ergódico.

2.3 Função de correlação e expoente crítico dinâmico

Quando realizamos uma simulação numérica estamos interessados em obter o valor de um dado observável (Φ) numa determinada temperatura; este observável pode ser energia, magnetização etc. Nas simulações que utilizam processos estocásticos, estes observáveis são obtidos através de sucessivas mudanças na configuração do sistema e a cada mudança de configuração os observáveis são calculados. Assim, obtem-se uma seqüência de valores para $\Phi(t)$, correspondente ao valor do mesmo em cada configuração do sistema. O valor obtido de Φ a uma dada temperatura é a média aritmética de $\Phi(t)$. Note que nas simulações de Monte Carlo, o tempo não tem relação com o tempo real mas sim com a ordem em que as configurações foram geradas.

A forma como é feita essa mudança de configuração depende do algoritmo utilizado. Alguns algoritmos mudam o estado de um sítio por vez e outros formam ilhas de sítios e fazem a mudança do estado de todos os sítios do aglomerado ao mesmo tempo. Independente do método utilizado para mudar a configuração do sistema, é evidente que a configuração posterior a uma mudança é dependente da configuração anterior. Essa correlação entre duas configurações se reflete também nos observáveis medidos, ou seja, entre as medidas $\Phi(t)$ e $\Phi(t+1)$ existe uma correlação. Podemos ver também que, se a medida $\Phi(t+2)$ está correlacionada a $\Phi(t+1)$, então também pode estar correlacionada a $\Phi(t)$. Assim, para avaliarmos corretamente a grandeza Φ e seu respectivo erro temos de tomar o cuidado de utilizarmos apenas dados descorrelacionados.

A correlação entre medidas depende de vários fatores: modelo, algoritmo, tamanho da rede, temperatura etc. Dada uma série tem-

poral de um observável $\Phi(t)$, a função de correlação entre medidas subsequentes é definida como:

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \int_0^\infty [\Phi(t') - \langle \Phi \rangle][\Phi(t' + t) - \langle \Phi \rangle] dt' \\ &= \int [\Phi(t')\Phi(t' + t) - \langle \Phi \rangle^2] dt'\end{aligned}\quad (2.14)$$

A Eq. 2.14 é a função de correlação contínua do observável Φ . O “tempo” em uma simulação estocástica é discreto e está ligado apenas à ordem com que as configurações são geradas. Portanto, se discretizarmos a Eq. 2.14, obtemos, a menos de uma constante:

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \frac{1}{t_{\max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{\max}-t} \Phi(t')\Phi(t' + t) - \frac{1}{t_{\max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{\max}-t} \Phi(t') \\ &\quad \times \frac{1}{t_{\max} - t} \sum_{t'=0}^{t_{\max}-t} \Phi(t' + t)\end{aligned}\quad (2.15)$$

onde t_{\max} é o número máximo de dados que a série do observável Φ possui. Na Fig. 2.2 é apresentado um gráfico típico da função de correlação de uma simulação utilizando um algoritmo de ilha. É esperado que a correlação entre duas medidas decaia exponencialmente, como é apresentado na Fig. 2.2. Então, supõe-se que a função de correlação seja do tipo:

$$\rho(t) \sim e^{-t/\tau} \quad (2.16)$$

onde τ é chamado de **tempo de correlação**. Assim, da Eq. 2.16 podemos ver que dois dados tomados com uma diferença de tempo $t = \tau$ tem uma correlação que é aproximadamente 2.72 vezes menor que a correlação máxima. Estatisticamente, o intervalo em que dois dados podem ser considerados descorrelacionados é $\Delta t = 2\tau$. Podemos mostrar que utilizando este intervalo os erros são dados pelo desvio padrão das medidas (Newman e Barkema 1999).

Existem dois métodos para determinar o tempo de correlação. Um deles é fazendo um gráfico semi-log da função de correlação e realizando um ajuste linear conforme a Eq. 2.16. O outro método também

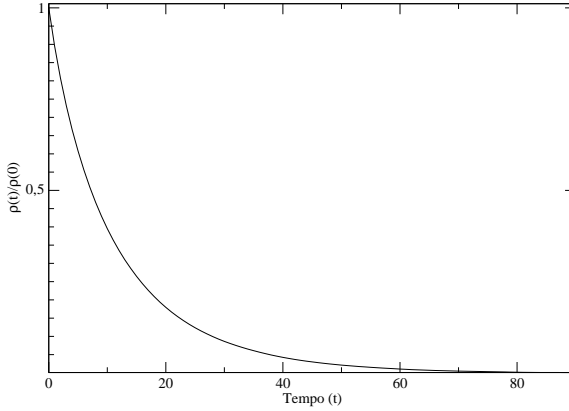


Figura 2.2: Gráfico da função de correlação da magnetização do modelo de Ising de uma rede de tamanho linear $L = 128$ utilizando o algoritmo de Wolff.

faz uso da relação expressa na Eq. 2.16, porém é levado em conta que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(t)}{\rho(0)} dt = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|t|/\tau} dt = 2\tau \quad (2.17)$$

ou seja, o tempo de correlação também pode ser obtido integrando a função de correlação normalizada. Os limites de integração de $-\infty$ até ∞ é porque assume-se que a correlação é a mesma para tempos futuros e tempos passados. Para o caso discreto, o tempo de correlação medido através da integral é dado por (Baillie e Coddington 1991):

$$\tau = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{t=\infty} \frac{\rho(t)}{\rho(0)} \quad (2.18)$$

Na Fig. 2.3 é apresentado o gráfico semi-log da função de correlação da energia onde foram utilizados os dois métodos para calcular o tempo de correlação. Como pode ser observado, o tempo de correlação calculado pelo método integral ($\tau = 12,57$) é ligeiramente inferior ao medido pelo método de ajuste linear ($\tau = 14,13$). Apesar de se esperar que a função de correlação tenha um decaimento exponencial, como pode ser visto na Fig. 2.3, ela não é tão bem comportada, sendo

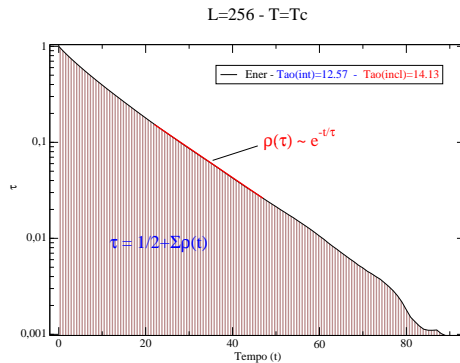


Figura 2.3: Gráfico semi-log da função de correlação da energia para uma rede quadrada 256x256 do modelo de Ising utilizando o algoritmo de Wolff. Em azul é apresentado o tempo de correlação calculado através do método integral e em vermelho pelo método do ajuste linear. Os índices *int* e *incl* se referem a τ medido pelo método integral e pelo método de ajuste linear, respectivamente.

que para tempos longos fica nítido que não apresenta o comportamento esperado; isso se deve ao fato de que nesta região temos poucos dados, ou seja, uma estatística ruim. Portanto, ao aplicar o método de ajuste linear é necessário definir uma região onde a função tenha um decaimento exponencial. Essa escolha é arbitrária e introduz uma aproximação não controlada no cálculo de τ . Fizemos diversas simulações utilizando os mesmos parâmetros, mudando apenas a semente do gerador de número aleatório, e calculamos a função de correlação; observamos que o tempo de correlação medido por ajuste linear possuía uma flutuação bem maior que o método integral. Por estes motivos, neste trabalho os tempos de correlação sempre serão calculados pelo método integral.

Entretanto, ambos os métodos supõem válida a eq. 2.16. Este não é sempre o caso, como veremos adiante e como comentado nas Refs. (Newman e Barkema 1999) e (Wansleben e Landau 1987). Segundo a Eq. 2.16, a função de correlação apresenta apenas um tempo de correlação. Porém, em alguns casos, esta função deve ser ajustada por mais de uma exponencial e assim existe mais de um tempo de corre-

lação associado à função (Landau e Binder 2000). O tempo de correlação utilizado deve ser sempre o maior observado. Fazer um ajuste com mais de uma exponencial é um pouco complexo e como o cálculo através da integral irá nos fornecer a soma destes tempos decidimos não nos preocupar com estes ajustes. Como veremos nos resultados, as funções que precisam ser ajustadas por mais de uma exponencial são aquelas que apresentam menor tempo de correlação e portanto podem ser negligenciadas.

Como já foi dito, o tempo de correlação depende de vários fatores; entre eles, podemos citar quatro que são os mais relevantes: algoritmo utilizado, modelo estudado, temperatura e tamanho linear da rede. Uma hipótese é que exatamente na temperatura crítica o tempo de correlação (τ) cresce com uma lei de potência do tipo:

$$\tau \sim L^z \quad (2.19)$$

onde L é o tamanho linear da rede e z é chamado de *expoente crítico dinâmico*. O valor de z só depende do modelo estudado e do algoritmo utilizado para fazer a simulação. Este fenômeno é conhecido como “*critical slowing down*”. Portanto, quanto maior o tamanho da rede, mais configurações devem ser geradas para se obter duas medidas independentes. Como o objetivo de várias simulações é estudar sistemas os maiores possíveis ($L \gg 1$) e perto da temperatura crítica, este fenômeno pode tornar as simulações ineficientes.

Devido ao “*critical slowing down*”, quanto maior a rede, maior é o tempo computacional necessário para se obter duas configurações decorrelacionadas. Existem vários algoritmos que visam otimizar a simulação diminuindo o valor do expoente crítico dinâmico. O algoritmo de Niedermayer (Niedermayer 1988) é um dos algoritmos que visam a redução do “*critical slowing down*”. Nosso objetivo principal será determinar qual valor de E_0 minimiza este efeito. Daremos também atenção para o caso de $E_0 = 1$ a fim de determinar se a Eq. 2.19 é válida também para o algoritmo de Wolff e, se o for, calcular o valor de z .

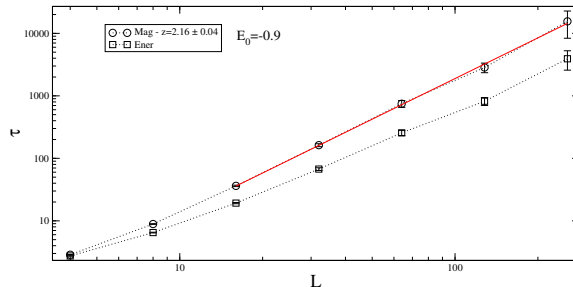


Figura 2.4: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -0,9$.

2.4 Resultados

2.4.1 Modelo de Ising

A primeira parte deste trabalho foi feita simulando o modelo de Ising na temperatura crítica ($T_c = -2/\ln(\sqrt{2}-1)$) na rede quadrada, para vários tamanhos de rede L e vários valores de E_0 ($-0,9$; $-0,5$; 0 ; $0,3$; $0,5$; $0,7$; $0,9$; 1 ; $1,02$; $1,05$ e $1,1$).

Na Fig. 2.4 é apresentado o gráfico log-log do tempo de correlação (τ) em função do tamanho da rede (L) para $E_0 = -0,9$; também é apresentado o ajuste utilizando a Eq. 2.19 e o valor para o expoente crítico dinâmico z . Para redes maiores que $L = 8$ o crescimento do tempo de correlação segue de forma precisa uma lei de potência. O expoente z medido para a magnetização, dentro da barra de erro, é consistente com o algoritmo de Metropolis ($2,165 \pm 0,0012$) (Nightingale e Blöte 1996). Como foi dito anteriormente, o parâmetro E_0 controla o tamanho médio das ilhas; porém, como podemos observar na Fig. 2.5, o tamanho médio das ilhas é constante para $L > 8$ ($\langle n \rangle \simeq 1,165$).

Note que, para comparar diretamente com Metropolis, os tempos de correlação são normalizados através da relação:

$$\tau_M = \frac{\langle n \rangle}{L^2} \cdot \tau_N \quad (2.20)$$

onde τ_M é o tempo de correlação medidos em passos de Monte Carlo por spin (unidade de tempo utilizada no algoritmo de Metropolis) e τ_N

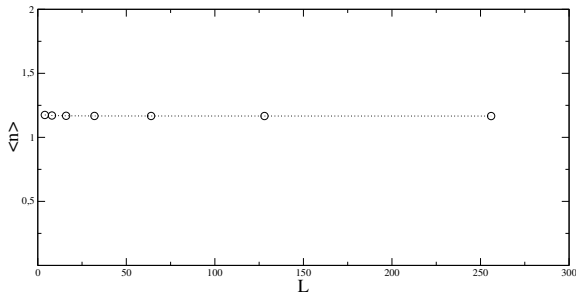


Figura 2.5: Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = -0,9$.

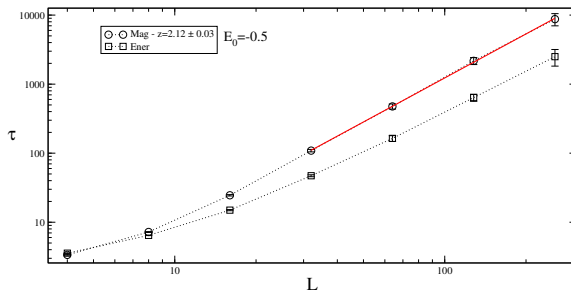


Figura 2.6: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -0,5$.

é o tempo de correlação medido em passos de Niedermayer (cada tentativa de virar uma ilha é um passo de Niedermayer).

Na Fig. 2.6 é apresentado o gráfico log-log de τ em função de L para $E_0 = -0,5$. O comportamento do tempo de correlação é o mesmo observado quando $E_0 = -0,9$. Porém, a curva só segue o comportamento de lei de potência quando $L > 16$ e, nessa região, $z = 2,12 \pm 0,02$. Na Fig. 2.7 é apresentado o gráfico do tamanho médio da ilha em função de L : novamente podemos ver uma saturação do tamanho médio das ilhas ($\langle n \rangle = 2,37$), a qual acontece para $L > 16$. Parece evidente a relação entre a saturação de $\langle n \rangle$, a partir de um dado \tilde{L} , e o fato de τ obedecer a Eq. 2.19, com z sendo dado aproximadamente pelo seu valor para Metropolis, para $L > \tilde{L}$.

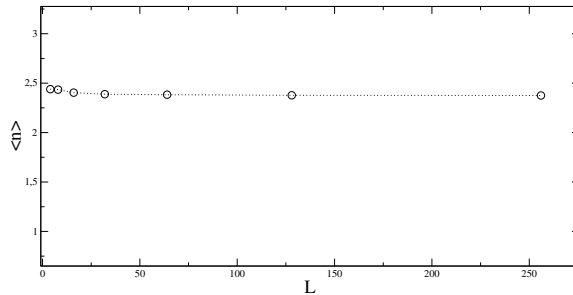


Figura 2.7: Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = -0,5$.

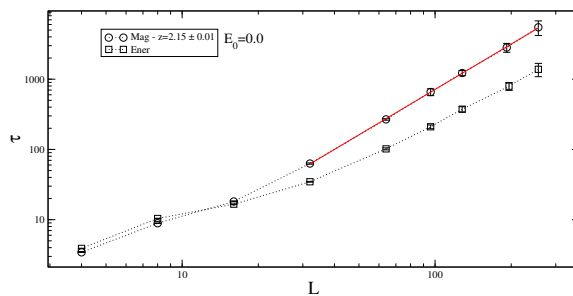


Figura 2.8: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,0$.

Na Fig. 2.8 podemos ver outro aspecto, diferente do observado anteriormente. Para L igual a 4 ou 8 o tempo de correlação da energia é maior que o da magnetização e em $L = 16$ eles são iguais. Até então, o tempo de correlação da magnetização era sempre maior que o da energia. A partir de $L = 16$ o comportamento da curva se torna igual ao de Metropolis, com o mesmo expoente z . Também a partir deste valor de L , $\langle n \rangle$ torna-se constante. Observando a Fig. 2.9 podemos ver novamente que os valores de L que não seguem o crescimento do tipo lei de potência estão relacionados a uma mudança no tamanho médio das ilhas. Quando $\langle n \rangle$ torna-se constante observa-se, de novo, o comportamento de Metropolis.

O comportamento do tempo de correlação para $E_0 = 0,3$ e $E_0 =$

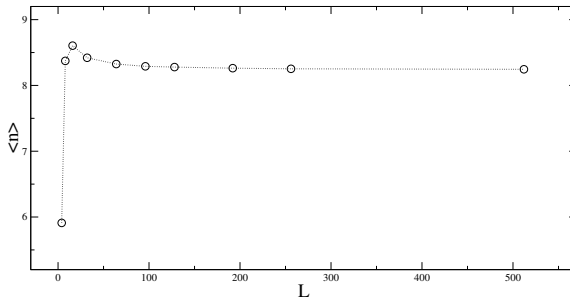


Figura 2.9: Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = 0,0$.

0,5 (Fig. 2.10 e 2.11) é o mesmo observado em $E_0 = 0,0$. Inicialmente o tempo de correlação da energia é maior que o da magnetização e a partir de um dado L há uma inversão: o tempo de correlação da magnetização se torna maior e a curva assume um comportamento do tipo lei de potência. O expoente z é aproximadamente o mesmo observado em Metropolis para ambos os casos. Nas Figs. 2.12 e 2.13, podemos ver que o comportamento do tamanho médio das ilhas é o mesmo observado anteriormente, sendo que a saturação do tamanho médio para $E_0 = 0,3$ ocorre em $L \simeq 36$, com $\langle n \rangle \simeq 25$, e para $E_0 = 0,5$ a saturação ocorre em $L \simeq 64$, com $\langle n \rangle \simeq 73$. Novamente o comportamento diferente do tempo de correlação pode ser associado à variação do tamanho médio da ilha. Podemos ver que a inversão das curvas do tempo de correlação acontece aproximadamente quando o tamanho médio das ilhas satura.

Nas Fig. 2.14 e 2.15 são apresentados os gráficos das funções de correlação para $L = 8$ e 128 , respectivamente, para $E_0 = 0,3$. Pode-se notar que em ambos os casos o observável com maior tempo de correlação é o que tem o comportamento mais próximo da forma proposta na Eq. 2.16. Isto acontece para todos os valores de E_0 estudados. Como já foi dito anteriormente, o comportamento para tempos longos, observado na Fig. 2.15, se deve à baixa estatística dos dados.

Também podemos perceber que ambas as funções possuem a mesma inclinação, para valores intermediários de t , ou seja, se o tempo de correlação fosse medido pelo ajuste linear da curva, os dois observáveis apresentariam aproximadamente o mesmo tempo de correlação. Porém, os tempos de correlação medido via integral, em ambos

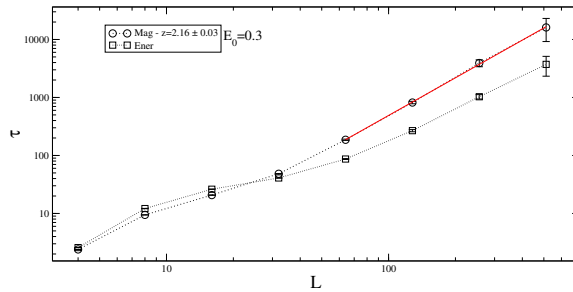


Figura 2.10: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,3$.

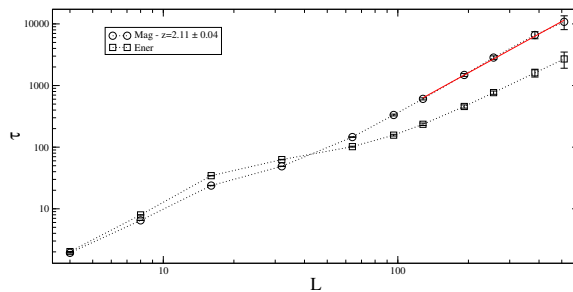


Figura 2.11: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,5$.

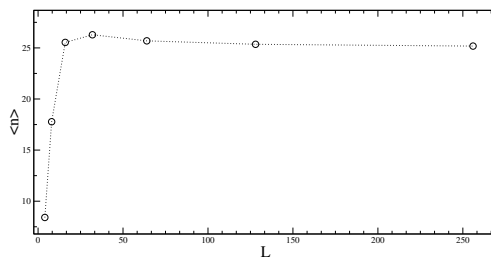


Figura 2.12: Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = 0,3$.

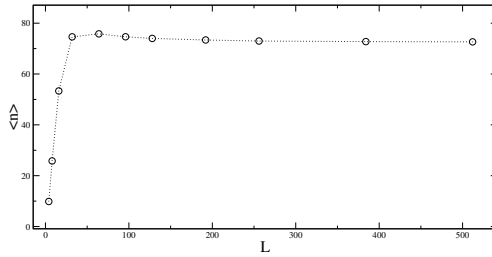


Figura 2.13: Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 0,5$.

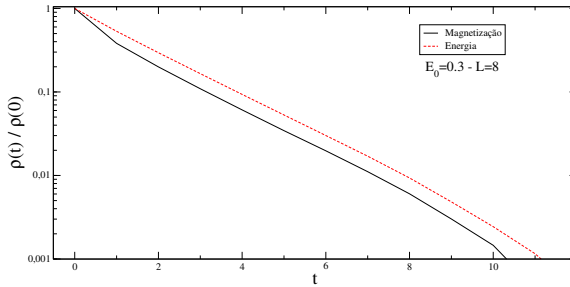


Figura 2.14: Gráfico semi-log das funções de correlação da magnetização e da energia, para $L = 8$ e $E_0 = 0,3$.

os casos, são diferentes. Estudos anteriores (Baillie e Coddington 1991, Edwards e Sokal 1989) do expoente crítico dinâmico z mostram que os valores calculados através da integral, como não são susceptíveis a erro devido à escolha da região onde a função tem o decaimento exponencial, fornecem resultados melhores.

Na Fig. 2.16 podemos ver que para $E_0 = 0,9$ o comportamento é o mesmo observado nos dois casos anteriores, porém o ponto onde a curva da magnetização cruza com a da energia é em $L \simeq 512$ e, pelo que observamos anteriormente, o tamanho médio da ilha deve saturar neste ponto (ver fig. 2.17). Esse tamanho máximo das ilhas para $E_0 = 0,9$ é $\langle n \rangle \simeq 12200$. Podemos inferir que os próximos tempos de correlação seguirão a Eq. 2.19; entretanto, os valores de L necessários para definir este comportamento estão além da nossa capacidade computacional atual.

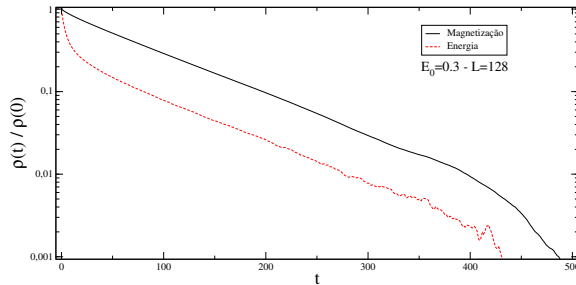


Figura 2.15: Gráfico semi-log das funções de correlação da magnetização e da energia, para $L = 128$ e $E_0 = 0,3$.

Observamos que, variando $-1 < E_0 < 1$, a partir de um determinado valor de L o tamanho médio das ilhas ($\langle n \rangle$) não varia mais com L . A partir deste ponto o algoritmo de Niedermayer tem um comportamento análogo ao do algoritmo de Metropolis, apresentando inclusive o mesmo expoente crítico dinâmico (para valores de L menores que o ponto de saturação de $\langle n \rangle$ não é possível estabelecer uma lei tão simples como a Eq. 2.19 para o comportamento do tempo de correlação). Também observou-se que, enquanto há uma mudança em $\langle n \rangle$, a energia possui sempre o maior tempo de correlação. Não existe nenhum valor de E_0 entre -1 e 1 que faça com que o algoritmo de Niedermayer seja mais eficiente que o de Wolff ($E_0 = 1$), pois para valores de L suficientemente grandes o algoritmo de Niedermayer se comporta exatamente como o de Metropolis. Podemos interpretar qualitativamente este resultado através da saturação de $\langle n \rangle$: já que esta grandeza assume um valor máximo, não importando o quanto L cresça, o tamanho médio da ilha virada fica, relativamente a L , cada vez menor. Este comportamento faz com que o algoritmo esteja na mesma classe de universalidade dinâmica do algoritmo de Metropolis.

Agora chegamos ao valor de $E_0 = 1$. Como vimos anteriormente, este valor de E_0 é equivalente ao algoritmo de Wolff. O comportamento crítico dinâmico do algoritmo de Wolff já foi muito estudado anteriormente (Baillie e Coddington 1991). Resolvemos discutir este caso especial para testar o nosso programa e melhorar os dados disponíveis acerca do algoritmo de Wolff, já que, devido à melhoria da capacidade computacional, em relação a trabalhos anteriores, podemos ir a redes muito maiores.

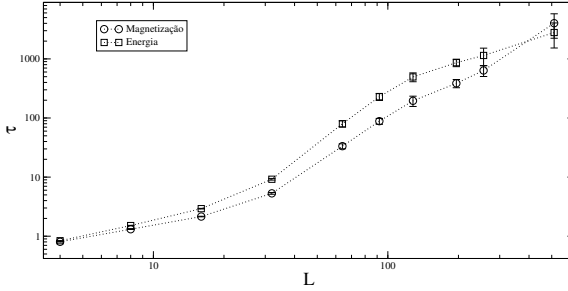


Figura 2.16: Gráfico log-log de τ em função de L da energia (quadrado) e da magnetização (círculo), para $E_0 = 0,9$.

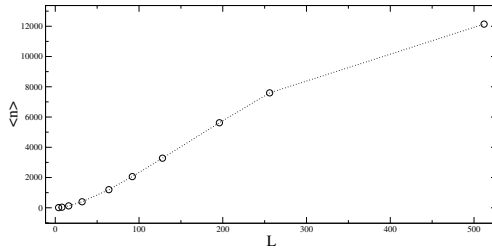


Figura 2.17: Gráfico do tamanho médio das ilhas $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 0,9$.

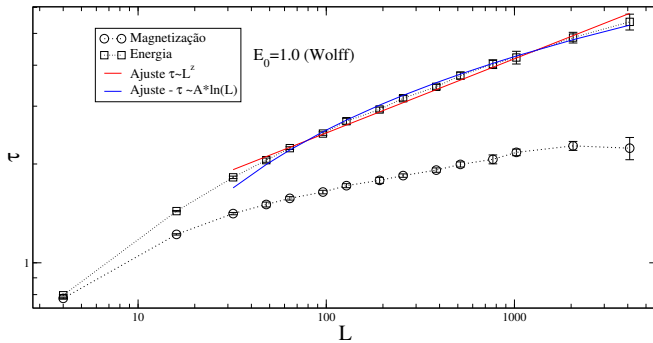


Figura 2.18: Gráfico log-log de τ em função de L da energia (quadrado) e da magnetização (círculo), para $E_0 = 1,0$. A curva vermelha é uma tentativa de ajuste do tipo lei de potência e em azul um ajuste do tipo logarítmico.

Os trabalhos que estudam o comportamento crítico dinâmico do algoritmo de Wolff não apresentam um consenso sobre o valor de z . Para alguns ele é pequeno e para outros ele obedece uma lei de crescimento do tipo logarítmica. Essa discordância nos valores de z medidos provavelmente se deve ao observável utilizado na medida ou a não ter-se atingido valores de L grandes o suficiente para verificarmos a dependência assintótica com esta grandeza. Como o algoritmo de Wolff é um caso especial do algoritmo de Niedermayer ($E_0 = 1$) fizemos simulações até $L = 4096$ para este valor de E_0 , a fim de estudar o comportamento dinâmico daquele algoritmo. Tomamos o cuidado de obter os dados com boa precisão para que pudéssemos verificar se a lei que rege o tempo de correlação, para este algoritmo, é do tipo logarítmica ou de potência.

Na Fig. 2.18 podemos ver o gráfico log-log do tempo de correlação em função L para $E_0 = 1,0$. Quando se quer obter dados descorrelacionados se deve sempre utilizar o maior tempo de correlação, portanto, para este caso, nos concentramos em analisar a curva do tempo de correlação da energia. Além disso, conforme já observamos, a grandeza termodinâmica com maior tempo de correlação é a que melhor se adapta à Eq. 2.16. A curva vermelha é uma tentativa de ajuste seguindo a Eq. 2.19. Fica evidente que essa equação não é o melhor ajuste para o comportamento do tempo de correlação. Na curva azul

foi proposto um ajuste do tipo logarítmico:

$$\tau \sim B * \ln(L), \quad (2.21)$$

Como podemos ver, este ajuste logarítmico é igualmente inadequado. Note que os pontos $L = 4$ e $L = 16$ foram excluídos do ajuste pois para redes pequenas espera-se que haja efeitos de escala finita, desviando o resultado do comportamento esperado.

Coddington e Baillie (Coddington e Baillie 1992, Baillie e Coddington 1991) estudaram o comportamento dinâmico do algoritmo de Wolff simulando o mesmo modelo que utilizamos neste trabalho. Contudo, a maior rede simulada naquele trabalho foi $L = 512$. Concluíram então que não era possível determinar qual ajuste era mais apropriado. Vemos que, até $L = 512$, o nosso resultado é o mesmo obtido por eles: a curva se ajusta bem às duas leis. Porém, simulando redes maiores foi possível observar que nenhuma das duas leis é boa o suficiente para descrever o comportamento de τ em função de L .

No intuito de buscar uma solução para o problema, propomos dois tipos de ajustes. O primeiro ajuste foi pensado lembrando que não havia um consenso entre uma lei do tipo potência e uma lei do tipo logarítmica. Então sugerimos um comportamento do tipo *potência do logaritmo*:

$$\tau \sim B * \ln(L)^w + C \quad (2.22)$$

Também tentamos um outro ajuste, pensando na possibilidade da lei de potência não se ajustar bem por um efeito de escala finita, ou seja, quando L não é suficientemente grande, pode haver um pequeno desvio da lei de potência pura, Eq.2.19, sendo necessária uma *correção à lei de escala*:

$$\tau \sim a * L^z (1 + b * L^c) \quad (2.23)$$

Na Fig. 2.19 vemos as duas tentativas de ajuste para τ da energia, todos feitos utilizando o programa GNU PLOT (Crawford et al. 2006). O ajuste do tipo *potência do logaritmo* descreve bem a curva, inclusive para os valores de L pequenos (≤ 16). A forma do tipo *correção de escala* se ajusta bem mas falha para $L = 4$. O comportamento de τ em função de L , na temperatura crítica, parece ser melhor descrito pela Eq. 2.22. Numa análise superficial, entretanto, fica difícil definir qual dos dois ajustes é melhor.

Existem dois fatores que permitem fazer uma análise mais téc-

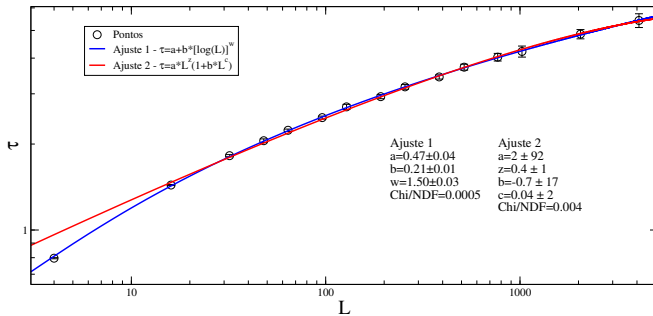


Figura 2.19: Gráfico log-log de τ em função de L , para a energia para $E_0 = 1,0$. A curva vermelha é uma tentativa de ajuste do tipo correção de escala e em azul um ajuste do tipo potência do logaritmo.

nica. O primeiro deles é o que chamamos de Chi/NDF , que é o valor do chi quadrado dividido pelo número de graus de liberdade do ajuste. O Chi é calculado através de:

$$Chi = \sum_{i=1}^k \frac{O_i - E_i}{E_i} \quad (2.24)$$

onde O_i é o i -ésimo valor observado e E_i é o valor esperado. O número de graus de liberdade é a diferença entre o número de pontos observados e o número de parâmetros a serem ajustados. Como podemos ver, o ajuste do tipo potência do logaritmo possui o menor Chi/NDF . Isso significa que a distância entre a curva e os pontos é menor que para o ajuste do tipo correção de escala. O segundo fator são os erros associados às variáveis; no ajuste com correção de escala, os erros são maiores que o próprio valor. Isso significa que o programa não consegue decidir direito qual o valor correto, sugerindo que aqueles valores devem ser descartados. Assim, optamos pelo ajuste do tipo *potência do logaritmo* que é o melhor entre as duas possibilidades propostas. O expoente w obtido foi $1,50 \pm 0,03$. Estou utilizando outro símbolo pois este expoente, apesar de ser um expoente dinâmico crítico, não segue a mesma lei da Eq. 2.19.

Uma das características importantes do algoritmo do Wolff é que o tamanho médio das ilhas ($\langle n \rangle$) pode ser relacionado com a

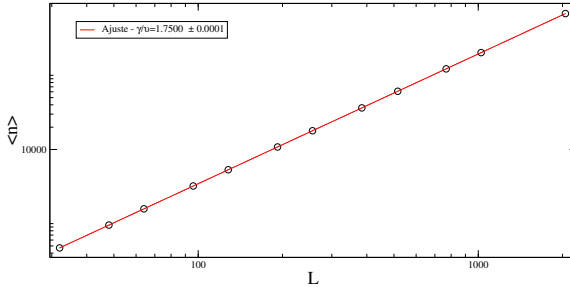


Figura 2.20: Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L , para $E_0 = 1,0$.

susceptibilidade (χ) do modelo de Ising, por (Newman e Barkema 1999):

$$\chi = \beta \langle n \rangle, \quad (2.25)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, para $T \geq T_c$. Mas a susceptibilidade, na temperatura crítica, se comporta como:

$$\chi \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}}, \quad (2.26)$$

onde γ é o expoente crítico da suscetibilidade e ν é o expoente crítico do comprimento de correlação. Assim, temos que:

$$\langle n \rangle \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (2.27)$$

Podemos então testar a qualidade dos nossos dados obtendo o expoente γ/ν das nossas simulações e comparando-o com $\gamma/\nu = 7/4$, que é conhecido exatamente para o modelo de Ising em duas dimensões.

Na Fig. 2.20 é apresentado o gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 1,0$ (algoritmo de Wolff). A curva vermelha é o ajuste utilizando a Eq. 2.27. Obtemos $\gamma/\nu = 1,7500 \pm 0,0001$, que concorda muito bem com o valor exato da relação.

Finalmente, veremos se existe um valor de $E_0 > 1$ que torne o algoritmo mais eficiente que o de Wolff, no que se refere ao "*critical slowing down*". Sabemos que, se $E_0 \rightarrow \infty$, todos os sítios serão adicionados à ilha e toda a rede será virada. Portanto, se houver um valor melhor que $E_0 = 1$, espera-se que ele não seja muito maior que 1.

Na Fig. 2.21 é apresentado o gráfico log-log de τ em função de L para a energia e a magnetização para $E_0 = 1,1$. Ambos apresentam

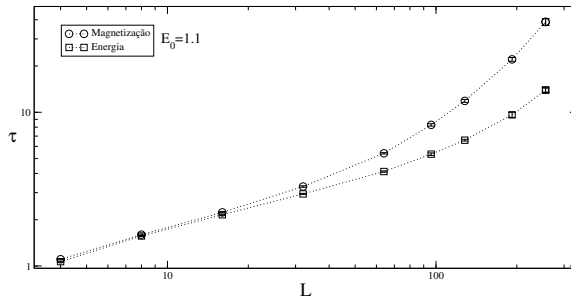


Figura 2.21: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 1,1$

tempo de correlação (para $L = 256$, $\tau_E = 13,9$ e $\tau_m = 37,8$) muito maiores que os apresentados para o algoritmo de Wolff ($\tau_E = 3,2$ e $\tau_m = 1,9$, também para $L = 256$). Mais ainda, o crescimento de τ com L para $E_0 = 1,1$ é bem mais pronunciado que para Wolff.

Ainda testamos se existe um valor de $E_0 < 1,1$ que otimize o algoritmo. Para isto, utilizamos o valor $E_0 = 1,02$. Na Fig. 2.22 é apresentado o gráfico log-log de τ em função de L para a energia e a magnetização, para este valor de E_0 . De novo, tanto a magnetização quanto a energia apresentam tempo de correlação (para $L = 1024$, $\tau_E = 5,0$ e $\tau_m = 4,9$) maiores que os apresentados para o algoritmo de Wolff ($\tau_E = 4,2$ e $\tau_m = 2,2$ para o mesmo L). A diferença do τ entre os dois algoritmos, para este valor de E_0 , é menor que para $E_0 = 1,1$ como esperado; contudo, o algoritmo de Wolff ainda é melhor. Portanto, se existir um valor de E_0 que otimize o algoritmo de Niedermayer ele deve estar entre $1,0 < E_0 < 1,02$. Pelo comportamento de τ para a magnetização, podemos inferir ainda que o tempo de correlação aumenta com L de forma mais rápida do que para Wolff.

2.4.2 Modelo XY

Originalmente, o trabalho publicado por Niedermayer se referia a um algoritmo aplicado ao modelo XY. Em seu trabalho, ele comparou a eficiência do algoritmo proposto com o de Metropolis, ambos aplicados a este modelo. A fim de poder comparar com o trabalho de Niedermayer, fizemos simulações também para o modelo XY.

No modelo XY clássico as variáveis de spins são vetores unitários

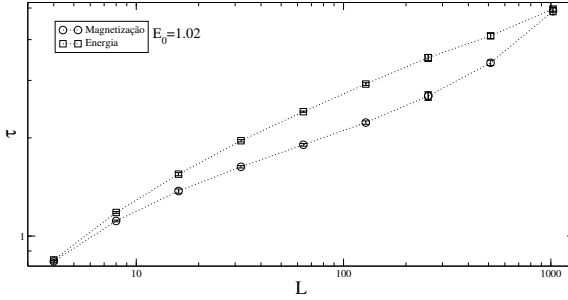


Figura 2.22: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 1,02$.

bidimensionais, com o hamiltoniano dado por:

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.28)$$

onde $\vec{S}_i = \cos(\theta_i)\hat{i} + \sin(\theta_i)\hat{j}$ é o vetor unitário do sítio i e θ_i é o ângulo que o vetor \vec{S}_i faz com um eixo x arbitrário.

Ao contrário do modelo de Ising, o modelo XY possui duas componentes da magnetização, uma na direção x (M_x) e outra na direção y (M_y) (as direções x e y são escolhidas arbitrariamente). Devido à simetria do modelo, o tempo de correlação pode ser calculado para qualquer uma das direções. Portanto, quando falamos em tempo de correlação da magnetização estaremos utilizando a magnetização ao quadrado M^2 , onde $M^2 = M_x^2 + M_y^2$, onde $M_x = \sum_i S_i^x$. Para o tempo de correlação da energia, o procedimento é o mesmo utilizado no modelo de Ising.

O algoritmo de Niedermayer recebe algumas modificações quando aplicado ao modelo XY. Primeiramente, é escolhida uma direção aleatória \hat{n} e um sítio S_i . Então, os vizinhos de S_i são adicionados à ilha com a probabilidade:

$$P_{add} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta J(\vec{S}_i \cdot \hat{n}) \cdot (\vec{S}_j \cdot \hat{n}) \cdot (1 + E_0)}, & \text{se } E_{ij} < E_0 \\ 0, & \text{se } E_{ij} \geq E_0 \end{cases} \quad (2.29)$$

Assim, um sítio j só é adicionado à ilha se ele possuir uma componente não nula na direção de \hat{n} igual, em sinal, à componente do

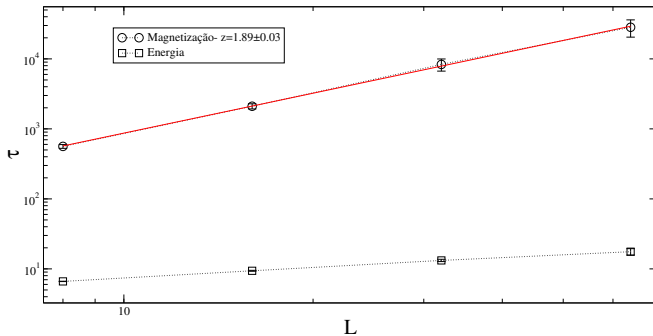


Figura 2.23: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -1,0$ (algoritmo de Metropolis).

sítio i . O processo é repetido para todos os sítios vizinhos de cada sítio pertencente à ilha. Após a ilha ser formada todos os sítios sofrem uma mudança de direção. A mudança é feita refletindo o vetor em relação ao eixo perpendicular a \hat{n} . O novo ângulo de cada sítio, $\theta_{s'}$, é dado por:

$$\theta_{s'} = -\theta_s + 2\theta_n - \pi \quad (2.30)$$

onde θ_s é o ângulo do vetor antes de ser virado e θ_n é o ângulo do vetor \hat{n} , todos em relação a um dado eixo.

Após todos os sítios serem “virados”, é calculada a nova energia do sistema. A nova configuração é aceita de acordo com:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\frac{\Delta E}{2} \beta(1-E_0)}, & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{se } \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (2.31)$$

Se a nova configuração não for aceita, todos os sítios retornam para o estado original. Informações mais detalhadas e a prova do balanço detalhado do modelo XY são apresentadas no Apêndice A.

Utilizando como base o comportamento observado para o modelo de Ising, escolhemos fazer simulações em cinco valores de E_0 ($-1,0$; $-0,5$; $0,0$ e $1,0$) e apenas com estes pontos foi possível observar que o comportamento do algoritmo no modelo XY é, qualitativamente, o mesmo observado no modelo de Ising. Todas as simulações

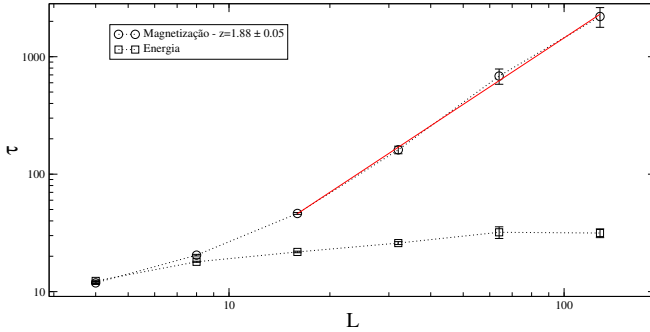


Figura 2.24: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = -0,5$.

foram feitas na temperatura $T_c = 0,8865 \pm 0,0015$ que era a temperatura de transição mais precisa da transição de Kosterlitz-Thouless (Weber e Minnhagen 1988) quando fizemos o trabalho. Atualmente a temperatura crítica mais precisa obtida para o modelo XY é $T_c = 0,8930 \pm 0,0009$ (Butera e Pernici 2008). Apesar de não termos simulado na melhor temperatura crítica estimada para o modelo, a diferença é de apenas 0,7%, pequena o suficiente para considerarmos que estamos na região de escala.

O primeiro valor $E_0 = -1,0$, como já vimos, tem o comportamento do algoritmo de Metropolis. Realizamos esta simulação para obter o expoente dinâmico do algoritmo, já que não existe nenhum registro deste valor na literatura. Na Fig.2.23 é apresentado o gráfico do tempo de correlação contra o tamanho linear, como podemos ver na figura o expoente dinâmico é $z = 1,89 \pm 0,03$. A maior rede simulada foi $L = 64$; como não estávamos interessados no algoritmo de Metropolis, não nos preocupamos em obter um valor preciso z . Este valor serve apenas para termos uma noção do comportamento do algoritmo de Niedermayer.

Nas Fig. 2.24 e 2.25 observamos o gráfico log-log de τ contra L para $E_0 = -0,5$ e $E_0 = 0,0$, respectivamente. Podemos ver que o comportamento das curvas é o mesmo observado no modelo de Ising. A partir de um dado valor de L a curva segue aproximadamente um crescimento do tipo lei de potência (Eq. 2.19). Observando as Fig.2.26 e 2.27 podemos ver que para o modelo XY também há uma saturação

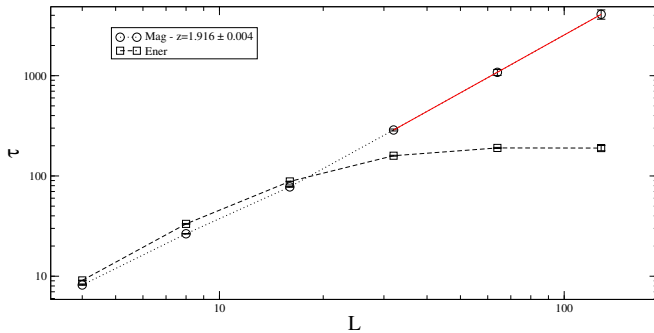


Figura 2.25: Gráfico log-log de τ em função de L para a energia (quadrado) e a magnetização (círculo), para $E_0 = 0,0$.

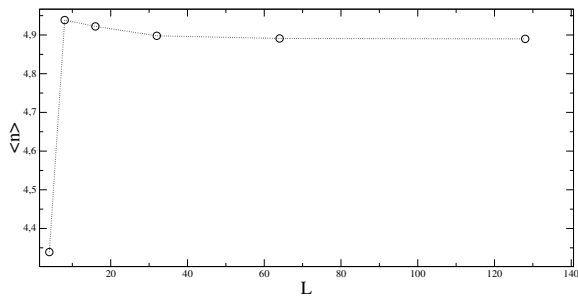


Figura 2.26: Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = -0,5$.

no tamanho médio das ilhas e a partir deste ponto o algoritmo apresenta o mesmo comportamento da Eq. 2.19, com $z = 1,88 \pm 0,05$, para $E_0 = -0,5$, e $z = 1,915 \pm 0,004$, para $E_0 = 0,0$. Considerando as barras de erro estes valores são iguais aos obtidos no algoritmo de Metropolis.

O teste seguinte foi para $E_0 = 1,0$, onde o algoritmo de Niedermayer se comporta como o algoritmo de Wolff. O comportamento do algoritmo apresentou algumas peculiaridades. Como podemos ver na figura 2.28, enquanto o tempo de correlação da energia cresce com L o tempo de correlação da magnetização diminui com L . Edwards e Sokal (Edwards e Sokal 1989) obtiveram o mesmo resultado simulando o mesmo sistema com o algoritmo de Wolff misto. Na Fig.2.28 também é apresentado o ajuste da Eq. 2.22. Como podemos ver a curva

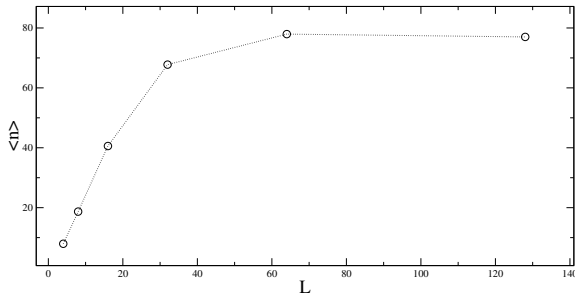


Figura 2.27: Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 0,0$.

se ajustou muito bem aos dados e o expoente obtido foi muito menor que o observado no modelo de Ising, $w = 0,36 \pm 0,12$. Acreditamos que neste caso, o motivo para termos erros grandes é o baixo número de pontos.

Na Fig. 2.29 apresentamos o gráfico log-log de $\langle n \rangle$ em função de L e observamos que $\langle n \rangle$ cresce como uma lei de potência de L e que não há nenhum indício de que $\langle n \rangle$ irá saturar. Observamos que a inclinação da curva é $1,745 \pm 0,009$, o mesmo valor esperado para $\gamma/\nu \simeq 2 - \eta = 7/4$ para o modelo XY.

2.5 Conclusões e Perspectivas

Estudando detalhadamente o algoritmo de Niedermayer podemos ver que, no intervalo $-1 < E_0 < 1$ e para L suficientemente grande, o algoritmo se comporta exatamente como um algoritmo local (Metropolis). Isso porque, a partir de determinado valor de L , o tamanho médio das ilhas formadas satura. Este efeito é observado tanto no modelo de Ising quanto no modelo XY. Com $E_0 > 1$ o algoritmo não apresentou nenhuma vantagem sobre o algoritmo de Wolff, aplicado ao modelo de Ising.

Apresentamos ainda resultados para $E_0 = 1$ (algoritmo de Wolff). A Eq. 2.19 é uma lei empírica, não existe cálculo teórico que mostre que o crescimento do tempo de correlação deva ser uma lei de potência de L . Na literatura não existe um consenso se o algoritmo de Wolff realmente segue a lei de potência, com $z \approx 0$, ou uma lei logarítmica. Com este trabalho foi possível mostrar que nenhuma das duas descreve bem o

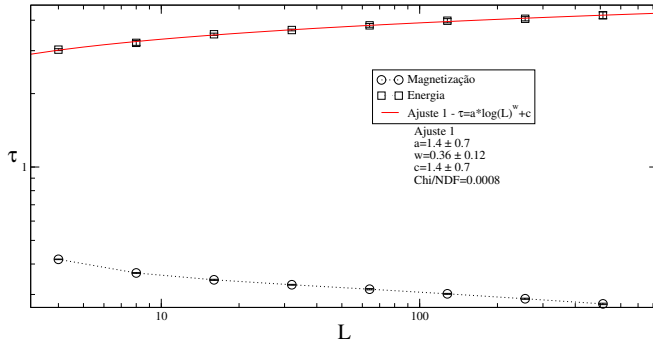


Figura 2.28: Gráfico log-log de τ em função de L da energia (quadrado) e da magnetização (círculo), para $E_0 = 1,0$. A curva vermelha é o ajuste proposto na Eq. 2.22, os parâmetros ajustados são apresentados na própria figura.

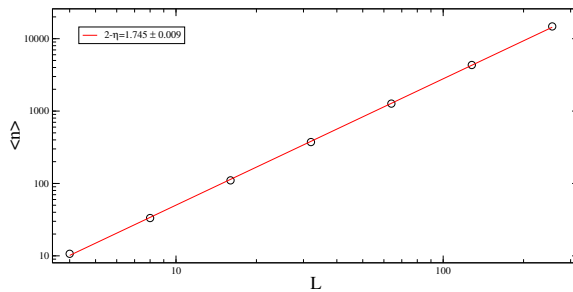


Figura 2.29: Gráfico de $\langle n \rangle$ em função de L para $E_0 = 1,0$.

comportamento do algoritmo. O melhor ajuste foi feito utilizando-se uma lei do tipo potência do logaritmo (Eq. 2.22). Para o modelo de Ising o expoente obtido foi $w = 1,50 \pm 0,02$ e para o modelo XY obtivemos $w = 0,36 \pm 0,12$. (É nossa intenção aplicar o algoritmo de Niedermayer a modelos que apresentam frustração, a fim de determinar se as barreiras de potencial são ultrapassadas de forma mais eficiente.)

3 COMPORTAMENTO CRÍTICO DE SISTEMAS APERIÓDICOS.

Neste capítulo iremos revisar brevemente o modelo de Potts, o método de escala de sistemas de tamanho finito (FSS - “*Finite-size scaling*”) e discutir sobre seqüências aperiódicas e os efeitos de interações aperiódicas em transições de fase. O objetivo geral desta parte é discutir o efeito da introdução de modulações aperiódicas em sistemas que apresentam transições de primeira ordem na sua versão homogênea.

3.1 Modelo de Potts

O modelo de Potts foi proposto em 1952 (Potts e Domb 1952) e pode ser visto como uma generalização do modelo de Ising para mais de dois estados; além disto, modela diferentes sistemas físicos para diferentes valores de q (definido a seguir). Neste modelo, cada sítio pode assumir q ($= 1, 2, 3...q$) estados e o hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \delta_{s_i s_j} \quad (3.1)$$

onde $\delta_{s_i s_j}$ é a delta de Kronecker ($\delta_{s_i s_j} = 1$ se $s_i = s_j$ e i e j e $\langle ij \rangle$ significa que a soma é feita sobre todos os pares de sítios primeiros vizinhos em uma dada rede. Em geral J é o mesmo para todos os pares de sítios, mas em alguns casos, como na existência de interações aperiódicas, ele pode variar de acordo com a ligação. Podemos ver que para $q = 2$ re-obtemos o modelo de Ising; para $q = 1$, por exemplo, é obtido o problema de percolação por ligações (Saleur e Duplantier 1987).

No caso de Ising, a magnetização é obtida fazendo a soma do estado de todos os sítios e dividindo-se pelo número de sítios da rede (N) e este é o parâmetro de ordem do modelo. Na fase ordenada $m \neq 0$ e na desordenada $m = 0$. A fim de quebrar a simetria em simulações de sistemas finitos (de tamanho linear L), o parâmetro de ordem nestes procedimentos é tomado com $m_L = |m|$ e não m (este último é sempre nulo para redes finitas sem campo). Para o modelo de Potts a analogia não é tão imediata, mas podemos pensar que cada um dos q estados corresponde a um vetor em uma direção e que todos estão igualmente espaçados (Wu 1982). Assim, é fácil ver que para $q = 2$ o modelo de Potts retoma o modelo de Ising. Para o modelo de Potts, o parâmetro

de ordem (“magnetização”) é dado por:

$$m_L(T) = \frac{q(\max_{\sigma}[\rho_{\sigma}]) - 1}{q - 1} \quad (3.2)$$

onde ρ_{σ} é a densidade de sítios no estado σ e $\max_{\sigma}[\rho_{\sigma}]$ é a densidade do estado de maior densidade. Da mesma forma que para Ising, a fase ordenada se dá quando $m_L \neq 0$ e a desordenada quando $m_L = 0$. A suscetibilidade magnética é calculada de forma usual:

$$\chi_L(T) = \beta N(\langle m_L^2 \rangle - \langle m_L \rangle^2) \quad (3.3)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, N é o número de sítios do sistema e m_L é o parâmetro de ordem (magnetização).

O modelo de Potts já foi estudado em várias dimensões e com vários valores de q , inclusive para valores de q não inteiros. Uma peculiaridade do modelo é que existe um valor de q_c acima do qual as transições de fase são de primeira ordem, enquanto abaixo deste valor as transições são contínuas. O valor de q_c varia com a dimensionalidade (d) do sistema; na Fig. 3.1 podemos ver o valor de q_c como função de d . Como podemos ver, $q_c = 4$ para $d = 2$, ou seja, para qualquer valor de $q > 4$ a transição será de primeira ordem. Quanto maior o valor de $q - q_c$, mais forte será a transição, deixando mais evidente a descontinuidade no parâmetro de ordem.

3.2 Transições de fase e comportamento crítico

Transições de fase são caracterizadas por singularidades na energia livre do sistema. Em geral, essa singularidade pode ser observada como uma mudança acentuada em alguma grandeza termodinâmica do sistema. A grandeza que caracteriza a transição de fase é denominada de *parâmetro de ordem*, pois indica se o sistema apresenta-se no estado ordenado.

No caso de sistemas ferromagnéticos o parâmetro de ordem é justamente a magnetização do sistema. Na transição de fase, o sistema passa do estado ferromagnético ($|m| > 0$) para o estado paramagnético ($m = 0$). Quando esta passagem se dá com o parâmetro de ordem indo a zero continuamente, diz-se que esta transição é *contínua* (ou, em alguns casos, de *segunda ordem*); se o parâmetro de ordem tem uma descontinuidade no ponto de transição, diz-se que esta transição

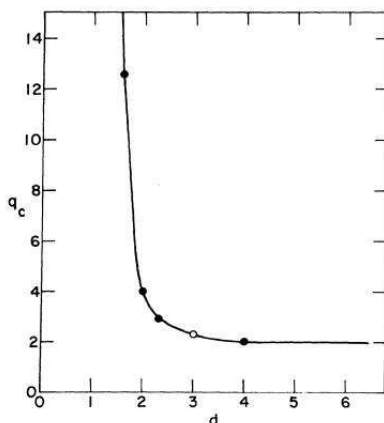


Figura 3.1: Valor de q_c como função de d obtido através de cálculos de grupo de renormalização variacional. Figura extraída de (Nienhuis, Riedel e Schick 1981).

é de *primeira ordem*. Em outras palavras, nas transições de primeira ordem há uma descontinuidade na magnetização e, nessas transições, há coexistência de fases. Na Fig. 3.2 é mostrado o comportamento da magnetização para as transições de primeira e segunda ordem (azul e vermelho, respectivamente).

Na proximidade da transição de fase contínua, todas as grandezas termodinâmicas apresentam um comportamento do tipo lei de potência. Definimos **temperatura reduzida**, t , como:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (3.4)$$

onde T_c é a temperatura onde há a transição de fase, chamada de **temperatura crítica**, para sistemas de transição contínua, e **temperatura de transição**, para sistema de transição de primeira ordem. Todas as grandezas termodinâmicas podem, em geral, ser escritas como leis de potência próximo a um ponto de transição contínua. Na Tabela 3.1 são apresentadas as grandezas termodinâmicas relevantes para o modelo de Potts com seus respectivos expoentes críticos, onde H é um campo externo (no caso, uniforme), o qual privilegia um dos q estados;

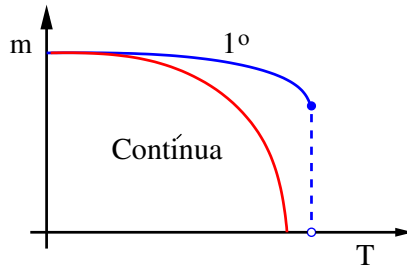


Figura 3.2: Representação das transições de primeira ordem (curva azul) e contínua (curva vermelha).

Magnetização a campo zero	$m \propto (-t)^\beta$
Calor específico a campo zero	$C_H \propto t ^{-\alpha}$
Suscetibilidade isotérmica a campo zero	$\chi_T \propto t ^{-\gamma}$
Comprimento de correlação	$\xi \propto t ^{-\nu}$

Tabela 3.1: Algumas grandezas termodinâmicas e seus respectivos expoentes críticos.

Estas relações só são válidas no limite $t \rightarrow 0$, ou seja, muito próximo de T_c e para transições contínuas. Este fenômeno é conhecido como comportamento crítico. Observa-se que os valores dos expoentes críticos não dependem de detalhes microscópicos dos sistema, mas apenas de algumas características globais: dimensionalidade, simetria do parâmetro de ordem, alcance da interação etc. Assim, observa-se que muitos sistemas físicos, a princípio diversos, apresentam os mesmos expoentes críticos. O conjunto de expoentes críticos de um sistema é chamado de *classe de universalidade*; quando dois sistemas apresentam os mesmos expoentes críticos, diz-se que eles pertencem à mesma classe de universalidade.

3.3 Seqüências aperiódicas

Seqüências aperiódicas são seqüências que não apresentam uma periodicidade, ou seja, não se pode definir uma pequena fração da seqüência que se repita ao longo de toda a seqüência. Uma forma de definir seqüências aperiódicas é através de regras de substituição determinísticas, que definiremos a seguir.

3.3.1 Criação de seqüências aperiódicas

Estas seqüências podem ser expressas através de um ordenamento de “letras” de um “alfabeto”. Vamos tomar como exemplo uma seqüência que apresenta apenas duas letras, A e B . A regra de substituição é aplicada a cada letra da seqüência a partir de um determinado estágio inicial (usualmente tomado como a letra A):

$$\begin{aligned}\zeta(A) &\rightarrow A^v B^l, \\ \zeta(B) &\rightarrow A^u B^h.\end{aligned}\tag{3.5}$$

onde v , l , u e h são parâmetros que informam quantas letras de cada tipo aparecerão após a aplicação da regra. Vamos tomar como exemplo $v = 1$, $l = 1$, $u = 2$ e $h = 0$. Assim, toda vez que a regra for aplicada a uma letra A ou B , irá gerar, respectivamente:

$$\begin{aligned}\zeta(A) &\rightarrow AB, \\ \zeta(B) &\rightarrow AA.\end{aligned}\tag{3.6}$$

As seqüências obtidas pela aplicação sucessiva destas regras numa letra inicial A seriam:

$$\begin{aligned}\zeta &\rightarrow AB \\ \zeta^2 &\rightarrow ABAA \\ \zeta^3 &\rightarrow ABAAAABAB \\ &\vdots\end{aligned}\tag{3.7}$$

Propriedades de uma regra de substituição podem ser descritas pela chamada *matriz de substituição*. Esta, para um sistema de duas letras (A e B), é definida como:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} N_A(A) & N_A(B) \\ N_B(A) & N_B(B) \end{pmatrix}.\tag{3.8}$$

de tal forma que:

$$\begin{pmatrix} N_A^{i+1} \\ N_B^{i+1} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} N_A^i \\ N_B^i \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

onde N_α^n é o número de letras α no estágio n de construção da palavra e $N_\alpha(\beta)$ é o número de letras α geradas ao aplicar a regra na letra β . Para a regra proposta na Eq. 3.6 a matriz de substituição é dada por:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} v & u \\ l & h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

O número de letras da sequência é dado, então por $N \sim \lambda_1^n$, para $n \gg 1$, onde n é o número de vezes que a regra de substituição é aplicada e λ_1 é o maior autovalor de \mathcal{M} . Uma grandeza importante no estudo de seqüências aperiódicas é a chamada flutuação. Define-se flutuação como:

$$g = |N_A(\alpha)^{n+1} - p_A N| \quad (3.11)$$

onde $N_A(\alpha)^{n+1}$ é o número de letras A geradas ao se aplicar a regra $n+1$ vezes à semente $\alpha = A$ e p_A é a probabilidade de ocorrência da letra A, em uma seqüência infinita, e N é o número total de letras na palavra após $n+1$ iterações. Podemos escrever a flutuação como uma lei de potência, assim:

$$g \propto N^\omega, \quad N \gg 1, \quad (3.12)$$

onde ω é o expoente de flutuação da seqüência. Podemos mostrar que ω é dado por:

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1} \quad (3.13)$$

onde λ_2 é o segundo maior autovalor da matriz de substituição \mathcal{M} .

3.3.2 Critério de Harris-Luck

Existem vários estudos sobre a influência da introdução de interações aperiódicas no comportamento crítico de sistemas. Nestes modelos aperiódicos, as constantes de troca, J_A e J_B , variam, em uma dada direção, de acordo com a seqüência aperiódica.

Observa-se que algumas seqüências aperiódicas de interações podem mudar a classe de universalidade do sistema. O critério de Harris-Luck determina quando uma seqüência altera a classe de universalidade (chamada de *seqüência relevante*) e quando não altera (chamada de *se-*

qüência irrelevante). Define-se o expoente de cruzamento (“*crossover*”) como:

$$\phi = 1 + d_a \nu (\omega - 1) \quad (3.14)$$

onde d_a é o número de dimensões onde a sequência atua, ν é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação do modelo uniforme e ω é o expoente de flutuação da sequência aperiódica. Então, se $\phi > 0$ a sequência é relevante, ou seja, muda a classe de universalidade do sistema, em relação ao modelo uniforme. Se $\phi < 0$, a sequência é irrelevante e não altera a classe de universalidade do sistema, ou seja, os expoentes críticos do modelo aperiódico são os mesmos do modelo homogêneo. Quando $\phi = 0$ diz-se que a sequência é marginal. Resultados numéricos aproximados indicam que para sequências marginais o modelo aperiódico apresenta expoentes dependentes da razão J_A/J_B (Faria 2006).

Como podemos ver na Eq. 3.14, a mudança da classe de universalidade não depende apenas da sequência aperiódica utilizada mas também do modelo, através de ν . Para modelos com transição de primeira ordem podemos utilizar $\nu = 1/d$ onde d é a dimensão do sistema (Fisher e Berker 1982).

Berche e colaboradores (Chatelain, Berche e Berche 1999) mostraram que, quando são adicionadas interações aperiódicas relevantes, o modelo de Potts de 8 estados deixa de ter uma transição de primeira ordem, mudando-a para uma transição de segunda ordem, de acordo com o critério de Harris-Luck. Entretanto, resultados análogos para desordens aleatórias indicam que a nova classe de universalidade pode depender do número de estados q do modelo de Potts (Cardy e Jacobsen 1997, Jacobsen e Cardy 1998).

O nosso interesse está voltado para as sequências relevantes ($\phi > 0$). Portanto, para o modelo de Potts de 6 e 15 estados e em duas dimensões ($\nu = 1/2$) vamos trabalhar com sequências onde $w > -1$. Também utilizaremos uma sequência irrelevante para verificar se o nosso método é capaz de diferenciar a mudança na classe de universalidade de forma efetiva e testar para mais casos a aplicação do critério de Harris-Luck a transições de primeira ordem.

3.4 Escala de tamanho finito

Simulações computacionais, necessariamente, lidam com sistemas de tamanho finito. Quando o sistema se aproxima da transição

de fase contínua ou de primeira ordem, esse tamanho finito pode esconder efeitos únicos que só acontecem no limite termodinâmico. Portanto, se queremos obter informações quantitativas do sistema no limite termodinâmico, é preciso saber interpretar os dados obtidos através de simulações de redes finitas e extrapolar para o limite termodinâmico.

O método que nos permite obter informações do sistema no limite termodinâmico utilizando as simulações de sistemas finitos é o método de *escala de tamanho finito* (FSS, do inglês “*finite-size scaling*”). Não iremos nos ater às deduções do método de FSS e iremos passar direto para a sua aplicação no estudo de transições de fase de primeira e segunda ordem.

Assim como no comportamento crítico, nas simulações de sistemas finitos as grandezas termodinâmicas também podem ser expressas como leis de potências. Neste caso, simulações feitas em $t \approx 0$ escalam com o tamanho linear da rede (L). O primeiro efeito ao simular redes finitas é um desvio na temperatura crítica. Observa-se que, quanto menor o tamanho da rede, mais longe de T_c ocorre a pseudo “transição de fase”. Assim, podemos definir ΔT , que é a diferença entre a temperatura pseudo-crítica de uma rede de tamanho L ($T_c(L)$) e a temperatura crítica da rede infinita ($T_c(\infty)$). Assim, ΔT depende de L na forma:

$$\Delta T = T_c(L) - T_c(\infty) \propto L^{-1/\nu} \quad (3.15)$$

onde ν é o expoente crítico do comprimento de correlação. Na Tabela 3.2 é apresentado a relação entre alguns observáveis e o tamanho linear da rede em $T = T_c(\infty)$ ($t = 0$). Portanto, realizando simulações em $t = 0$ com vários tamanhos de rede L podemos obter as razões β/ν , γ/ν e α/ν .

A criticalidade é uma característica exclusiva de sistemas que possuem transições contínuas. Assim, para sistemas com transição de primeira ordem não nos referimos a expoentes críticos. Neste trabalho, estaremos interessados em estudar o modelo de Potts em duas dimensões, com $q = 6$ e $q = 15$ e com interações aperiódicas. Como foi visto na seção anterior, a transição do modelo de Potts puro é de primeira ordem para estes valores de q . Entretanto, como estamos muito próximo de q_c , diferenciar a transição de primeira ordem da contínua não é algo simples. Apesar de não existir criticalidade na transição de primeira ordem, podemos utilizar as mesmas relações da tabela 3.2 para obter o que vamos chamar de expoentes “*pseudo-críticos*”. Para transições de primeira

Magnetização	$m \propto L^{-\frac{\beta}{\nu}}$
Suscetibilidade	$\chi \propto L^{\frac{\gamma}{\nu}}$
Calor específico	$C \propto L^{\frac{\alpha}{\nu}}$

Tabela 3.2: Principais grandezas termodinâmicas e suas relações com o tamanho da rede simulada, na temperatura crítica do sistema infinito.

ordem os expoentes pseudo-críticos devem ser $\beta/\nu = 0$ e $\gamma/\nu = 2$ para qualquer modelo em 2 dimensões (Chatelain, Berche e Berche 1999).

Utilizaremos a teoria de FSS para calcular os expoentes pseudo-críticos, a nova classe de universalidade (caso haja mudança de classe de universalidade) e evidenciar qual a ordem da transição. Na próxima seção apresentaremos o método que nos permite determinar qual o tipo de transição do sistema no limite termodinâmico.

3.5 Determinação da ordem da transição

Nosso objetivo pode ser dividido em duas partes: 1) determinar se a introdução das interações aperiódicas mudam a classe de universalidade e 2) se houver mudança de classe de universalidade, determinar qual a nova classe de universalidade. Como os sistemas estudados apresentam transição de primeira ordem, podemos mostrar a mudança da classe de universalidade apenas mostrando a mudança no tipo de transição. Existem diversas formas de determinar o tipo de transição de um sistema e o que apresentaremos nesta seção é o método utilizado neste trabalho.

Challa e colaboradores (Challa, Landau e Binder 1986) desenvolveram uma teoria fenomenológica, que futuramente foi comprovada numericamente (Peczak e Landau 1989), que nos permite verificar a ordem da transição. Obtemos (de uma simulação, por exemplo) a energia interna (E), a intervalos regulares de tempo, para diferentes configurações. Estes valores de E obedecem uma distribuição de probabilidade $P_L(E)$ e supõem-se que esta distribuição é uma Gaussiana centrada na

energia da rede infinita E_0 , correspondente à temperatura T e com largura proporcional ao calor específico C do sistema infinito. Assim, podemos escrever:

$$P_L(E) = \frac{A}{\sqrt{C}} \exp \left\{ - \frac{(E - E_0)^2 L^d}{2k_B T^2 C} \right\} \quad (3.16)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e A é uma constante de normalização. A mesma distribuição é proposta para a magnetização do sistema ($P_L(m)$), porém a largura da Gaussiana neste caso é dada pela suscetibilidade.

Nas transições de segunda ordem a distribuição de probabilidade pode ser descrita por apenas uma Gaussiana, pois a transição ocorre de forma contínua entre as fases ordenada e desordenada. Entretanto, nas transições de primeira ordem não há essa passagem contínua e o sistema apresenta coexistência de fases durante a transição. Na fase ordenada, vamos representar sua energia por E_- e na fase desordenada por E_+ . Nas transições de primeira ordem, a distribuição de probabilidade apresenta dois picos: um pico correspondente ao sistema no estado ordenado e outro correspondente ao estado desordenado. Assim, $P_L(E)$ deve ser escrita como a soma de duas Gaussianas:

$$P_L(E) = \frac{a_+}{\sqrt{C_+}} \exp \left\{ - \frac{[E - (E_+ + C_+ \Delta T)]^2 L^d}{2k_B T^2 C_+} \right\} + \frac{a_-}{\sqrt{C_-}} \exp \left\{ - \frac{[E - (E_- + C_- \Delta T)]^2 L^d}{2k_B T^2 C_-} \right\} \quad (3.17)$$

onde $a_{+(-)}$ são as constantes de normalização e $C_{+(-)}$ o calor específico para o caso desordenado e ordenado, respectivamente, e $\Delta T = T - T_c$. Na Fig. 3.3 é reproduzido o resultado obtido por Challa e colaboradores (Challa, Landau e Binder 1986) para simulações do modelo de Potts de 10 estados em duas dimensões. Como podemos ver, longe de T_c , $\langle E \rangle$ coincide com o máximo da gaussiana. Conforme nos aproximamos de T_c há o surgimento do pico da fase ordenada e $\langle E \rangle$ assume um valor que corresponde a uma média ponderada entre os dois picos.

Lee e Kosterlitz (Lee e Kosterlitz 1990) sugeriram que a dependência com o tamanho de rede L da energia livre em função de

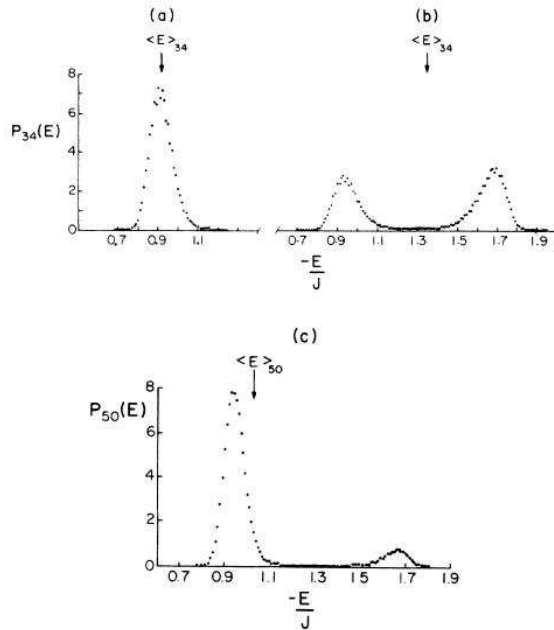


Figura 3.3: Distribuição de probabilidade para a energia interna em várias temperaturas obtidas na simulação do modelo de Potts na rede quadrada em duas dimensões. a) Resultado para uma rede de 34×34 a uma temperatura longe da temperatura crítica. b) O mesmo que a figura a), porém a uma temperatura muito próxima da temperatura crítica. c) Desigualdade da distribuição para uma rede 50×50 próximo da temperatura crítica.

E ,

$$F_L(E) = -\ln P_L(E), \quad (3.18)$$

pode ser usada para identificar transições de primeira-ordem. O método deles se utiliza do fato que para $L \gg \xi$, onde ξ é o comprimento de correlação do sistema, a energia livre numa transição de primeira ordem é formada por dois mínimos de igual profundidade e separados por um pico. A distribuição de probabilidade terá dois máximos separados por um mínimo. Se a barreira da energia livre (ΔF), definida como a diferença entre o mínimo e o pico da energia livre, aumenta com o tamanho do sistema, a transição será de primeira ordem no limite termodinâmico. Caso contrário, a transição será de segunda ordem.

Para determinar a barreira de energia, realizaremos simulações o mais próximo de $T_c(L)$ possível e então utilizamos o método de repesagem (DIAZ 2009) para obter a $P_L(E)$ na qual os dois picos estão na mesma altura. A barreira de energia pode ser obtida através de:

$$\Delta F = \ln \frac{P_L(E_{pico})}{P_L(E_{vale})} \quad (3.19)$$

onde E_{pico} e E_{vale} são os valores de energia onde $P_L(E)$ tem os seu máximo e seu mínimo, respectivamente. Realizando simulações numa faixa de temperatura próxima de $T_c(\infty)$, $T_c(L)$ é definido como o momento quando $P_L(E)$ apresenta dois picos com a mesma intensidade. A técnica de repesagem é utilizada para fazer um ajuste fino entre as intensidades dos picos.

O erro de ΔF pode ser calculado através da médias entre diferentes simulações utilizando diferentes números aleatórios (Chen, Ferrenberg e Landau 1995). Contudo, como estamos interessados apenas em determinar a ordem da transição e isso será feito apenas observando a tendência de ΔF em função de L , não há necessidade de calcularmos o erro desta grandeza. Este é um método simples e que não requer grande esforço computacional para determinar a ordem da transição.

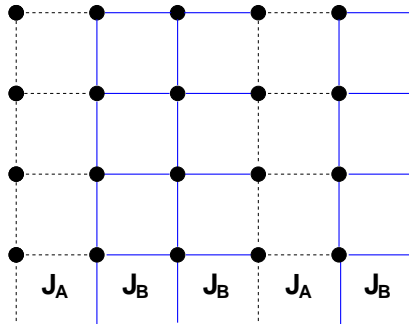


Figura 3.4: Esquema de como as interações aperiódicas são introduzidas na rede. Linhas tracejadas (cheias) representam interações J_A (J_B).

3.6 Resultados

3.6.1 Determinação de T_c

O nosso trabalho inicial é simular o modelo de Potts de 6 e 15 estados com interações aperiódicas. A aperiodicidade é introduzida em apenas uma direção, mudando os valores da energia de interação (J) de acordo com uma regra de substituição. Na direção horizontal as interações serão aperiódicas e na vertical elas terão o mesmo valor da interação horizontal subsequente. Na Fig. 3.4 é apresentada a forma como as interações aperiódicas são dispostas na rede. Como a aperiodicidade é introduzida em apenas uma dimensão, temos que $d_a = 1$ (veja Eq. 3.14).

Para realizar o nosso trabalho utilizamos o algoritmo de Wolff. Escolhemos este algoritmo porque, na região da transição de fase, é o que otimiza o tempo computacional. Deve-se tomar um pouco de cuidado com este algoritmo, em particular com o modelo de Potts, pois conforme aumentamos o valor de q a eficiência do algoritmo diminui. Isso é devido ao fato de que, com o aumento de q , o tamanho médio das ilhas diminui. Utilizamos redes retangulares com condições de contorno periódicas. Como a aperiodicidade é introduzida em apenas uma dimensão, optamos em trabalhar com redes retangulares para aumentar o número de gerações da sequência que são introduzidas no sistema. A rede, portanto, tem $N = pL \times L$ sítios, onde L é o tamanho linear da rede na direção vertical e pL o tamanho na direção horizontal.

Sequência	regra	ω	p	L_{max}
Three-Folding (TF)	$A \rightarrow ABA$ $B \rightarrow ABB$	$\omega = 0$	$p = 3$	$L = 6561$
Paper-Folding (PF)	$AA \rightarrow BAAA$ $AB \rightarrow BAAB$ $BA \rightarrow BBAA$ $BB \rightarrow BBAB$	$\omega = 0$	$p = 2$	$L = 8192$
Thue-Morse (TM)	$A \rightarrow AB$ $B \rightarrow BA$	$\omega = -\infty$	$p = 2$	$L = 4096$

Tabela 3.3: Sequências aperiódicas utilizadas com as suas regras de substituição e o expoente de flutuação ω . L_{max} é o maior tamanho de rede simulado.

Na tabela 3.3 são apresentadas as três sequências que iremos estudar neste trabalho. As duas primeiras, Three-Folding (TF) e Paper-Folding (PF), têm expoente de flutuação $\omega = 0$. Portanto, como vimos anteriormente, estas sequências no nosso sistema, de acordo com o critério de Harris-Luck, devem ser relevantes e devem mudar a classe de universalidade. A última sequência, Thue-Morse (TM), tem expoente $\omega = -\infty$ e, pelo mesmo critério, deve ser irrelevante. A sequência TM é a nossa sequência de controle, que vai permitir checar se somos capazes de diferenciar uma mudança de classe de universalidade devida à modulação.

Estas sequências foram escolhidas por um motivo especial. Através de argumentos de dualidade é possível determinar a temperatura crítica exata ($T_c(\infty)$) do sistema aperiódico. Todos os detalhes do argumento de dualidade podem ser obtidos em (Wu 1982, Savit 1980). Este argumento pode sempre ser usado quando o sistema for passível de uma transformação de dualidade. A transformação dual é feita construindo por cada ligação, uma ligação perpendicular a esta definindo então a rede dual. Substituindo-se as ligações J_A e J_B por ligações (perpendiculares) \tilde{J}_B e \tilde{J}_A respectivamente, de tal forma que ligações “fortes” são substituídas por ligações “fracas” e vice-versa, obtemos a transformação de dualidade. Como podemos ver na Fig.3.5 a transformação de dualidade transforma a rede quadrada em outra rede quadrada girada de 180° . Se a sequência de ligações do sistema original, lida da esquerda para direita como indicado na figura, for

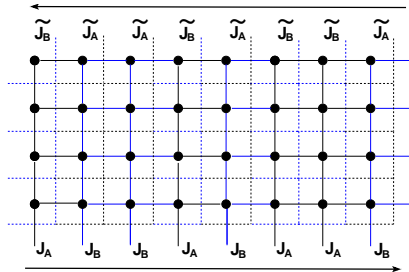


Figura 3.5: Esquema de como é feita a transformação de dualidade.

igual à sequência na rede dual, lida da direita para a esquerda, então o sistema é dito autodual.

Quando um sistema aperiódico é autodual, a temperatura crítica pode ser obtida resolvendo-se a seguinte equação:

$$(e^{K_c} - 1)(e^{K_c \cdot r} - 1) = q \quad (3.20)$$

onde $K_c = J_A/k_B T_c$, r é a razão J_B/J_A e q é o número de estados do sistema. Note que algumas sequências só são autoduais se desconsiderarmos algumas ligações. Por exemplo, para a sequência TF, temos:

Sequência $\rightarrow A B A A B B A B A A B A A B B A B B A B A A B B A B A$
 Dual $\rightarrow B A B A A B B A B A A B A A B B A B B A B A A B B A B$

Podemos ver que essa sequência só é autodual se ignorarmos a última ligação da sequência e a primeira da dual. No caso da sequência PF, ela só é autodual a partir da quinta geração ($L = 32$) e mesmo assim a primeira e a última ligação devem ser ignoradas. Apesar destas ligações diferentes, as sequências podem ser consideradas autoduais, pois o peso delas é irrelevante no limite termodinâmico.

3.6.2 Determinação da ordem da transição

Como já foi discutido, nosso primeiro passo é determinar se há mudança no tipo de transição. Utilizamos o método de Lee-Kosterlitz para verificar essa mudança. O procedimento é bem simples: calculamos o valor de ΔF para diferentes tamanhos de rede e fazemos o gráfico de ΔF em função de $1/L$. Fazemos o gráfico usando $1/L$ para deixar

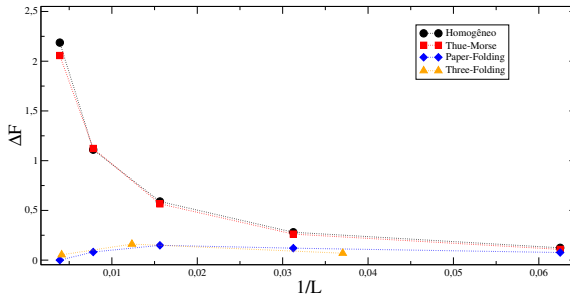


Figura 3.6: Gráfico da barreira de energia ΔF em função do inverso do tamanho de rede ($1/L$). O sistema homogêneo é uma rede retangular $2L \times L$ e as sequências aperiódicas têm $r = 0,9$ com $q = 6$.

evidente o comportamento de ΔF no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$ e $1/L \rightarrow 0$). Na Fig. 3.6 apresentamos o resultado para as sequências TM, PF, TF, com $r = 0,9$, e uma rede retangular ($2L \times L$) homogênea, com 6 estados. O gráfico não deixa dúvida que PF e TF, no limite termodinâmico, terão transições contínuas. Para TM vemos que ΔF segue o mesmo comportamento do sistema homogêneo, inclusive com valores muito próximos. Esta é uma forte evidência de que TM tem o mesmo tipo de transição do sistema homogêneo, no caso, de primeira ordem.

Na Fig. 3.7 vemos o gráfico das $P_L(E)$ das sequências PF (3.7(a)) e TM (3.7(b)) com diferentes tamanhos de rede L e simuladas em $T_c(L)$. No intervalo $16 \leq L \leq 64$ as duas sequências apresentam o mesmo comportamento qualitativo. Para $L > 64$ há uma mudança no comportamento da sequência PF: os dois picos começam a se aproximar e a razão entre a intensidade do pico e do vale começa a diminuir, refletindo na diminuição do ΔF . Podemos ver que em $L = 256$ não é possível localizar o vale, apenas um pequeno achatamento na $P_L(E)$. Para a sequência TM vemos que, conforme L aumenta, os dois picos ficam cada vez mais evidentes.

Escolhemos $r = 0,9$ pois para $r < 0,9$, nas sequências relevantes, não foi possível localizar os dois picos, independente do tamanho de rede simulado. Uma questão que fica aberta é se para valores de r menores, a sequência irrelevante pode sofrer uma transição de segunda ordem. Para checar esta possibilidade calculamos ΔF para a sequência

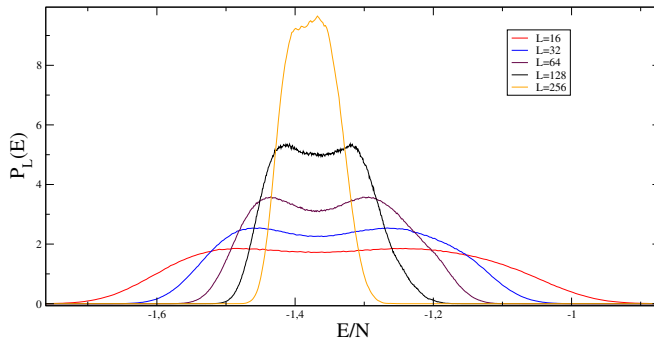
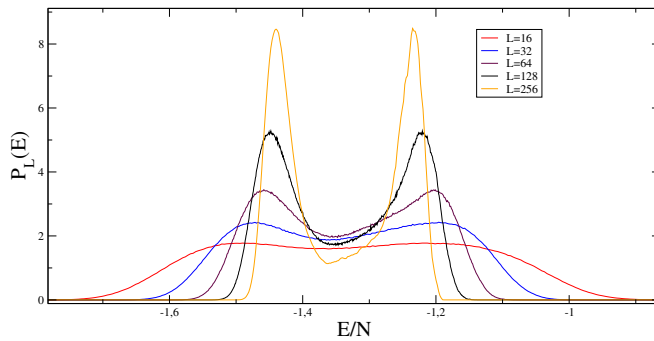
(a) Gráfico de $P_L(E)$ para a sequência PF com $r = 0,9$.(b) Gráfico de $P_L(E)$ para a sequência TM com $r = 0,9$.

Figura 3.7: Gráficos da distribuição de probabilidade para a sequência a) Paper-Folding e b) Thue-Morse com diferentes tamanhos de rede L e simuladas em $T_c(L)$.

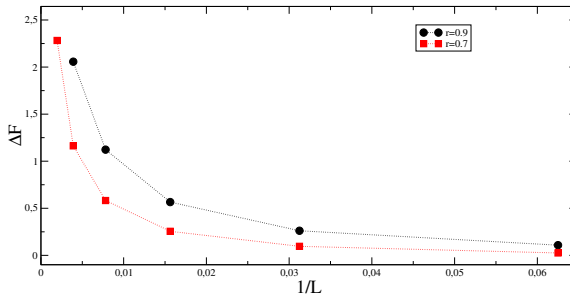


Figura 3.8: Gráfico da barreira de energia ΔF em função do inverso do tamanho de rede ($1/L$) para a sequência Thue-Morse com $r = 0,7$ e $0,9$ e $q = 6$.

TM com $r = 0,7$. Na figura 3.8 é apresentado o resultado para $r = 0,7$. Podemos ver que apesar do valor de ΔF ser menor para $r = 0,7$ do que para $r = 0,9$, qualitativamente ele apresenta o mesmo resultado que para este último valor de r . Não fomos para r menor que $0,7$ porque o aparecimento dos dois picos só ocorre em redes maiores que $L = 256$. O algoritmo de Wolff é muito eficiente quando simula-se em $T_c(\infty)$ mas para calcular o ΔF estas simulações devem ser feitas próximas de $T_c(L)$, onde o algoritmo se torna um pouco lento. A característica de que a sequência TM continua apresentando transição de primeira ordem mesmo para $r < 0,7$ será vista na próxima seção onde calcularemos os expoentes críticos.

3.6.3 Cálculo dos expoentes críticos

Já determinamos que as sequências relevantes (PF e TF) realmente mudam a classe de universalidade do sistema, ao contrário da sequência irrelevante (TM). Agora duas questões precisam ser respondidas: 1) Qual a nova classe de universalidade? 2) A nova classe de universalidade depende do número de estados q ?

A primeira pergunta é respondida utilizando a técnica de FSS. Da inclinação da curva no gráfico log-log da magnetização em função do tamanho de rede pL em $T = T_c(\infty)$ obtemos a relação entre os expoentes β/ν e do gráfico da susceptibilidade obtemos γ/ν . O gráfico pode ser feito apenas em função de L , optamos por pL para manter o mesmo padrão apresentado em (Berge, Chatelain e Berge 1998); isso não al-

tera em nada os resultados. Assim, obtendo as relações entre β/v e γ/v poderíamos inferir qual a nova classe de univesalidade. Para responder à segunda questão pretendíamos comparar os nossos resultados para $q = 6$ com os resultados obtidos em (Chatelain, Berche e Berche 1999) e (Berche, Chatelain e Berche 1998) ($q = 8$). Ao desenvolver este trabalho observamos que os dois q eram muito próximos e seria impossível decidir esta questão. Por este motivo também realizamos simulações em $q = 15$. Portanto, simulamos apenas $q = 6$ e 15 , onde neste último valor de q não foi possível simular redes do mesmo tamanho que para $q = 6$.

Como vimos no capítulo anterior, o maior problema nas simulações de Monte Carlo é o fenômeno conhecido como “*critical slowing down*”. Ou seja, o tempo de correlação τ deve crescer com L^z onde z é o expoente dinâmico crítico. Neste capítulo não foi nossa preocupação estimar o expoente z mas calcular o tempo de correlação para que pudessemos obter as configurações independentes. Como para calcular a função de auto-correlação, e daí obter o tempo de correlação, são necessárias simulações muito longas ($t_{MCS} > 1000\tau$), para as redes acima de $L > 1024$ era possível mas computacionalmente “caro” fazer simulações únicas com tantos dados.

Para contornar este problema utilizamos o seguinte estratagema: obtivemos o tempo de correlação com longas séries temporais ($> 2000\tau$) para redes com $L < 1000$ e fizemos um ajuste do tipo lei de potência. Extrapolando o ajuste estimamos o tempo de correlação para $L > 1000$. Na fig. 3.9 podemos ver o ajuste feito para a sequência PF com $q = 6$ e $r = 0,1$. A extropolação deste ajuste para $L = 8192$ mostra que $\tau \approx 710.000$ em unidades de passos de Wolff (um passo de Wolff corresponde a uma ilha virada). Contudo, ele sempre superestimou o tempo de correlação; apesar de fazer com que haja um desperdício de dados, isso não é um problema relevante no nosso caso. Ainda, por segurança, aplicamos um fator de 10% a τ para garantir que não estamos em hipótese alguma subestimando o tempo de correlação.

Todas as grandezas termodinâmicas foram calculadas utilizando-se no mínimo 1000 configurações independentes. Portanto, lembrando que cada configuração independente é obtida a cada 2τ , no caso acima foram necessários executar mais de 15 bilhões de passos de Wolff. Essa tarefa, em um único processador, levaria pelo menos 8 meses para ser realizada. Como solução, realizamos 20 simulações paralelas, com diferentes sementes do gerador de número aleatório, e depois de descar-

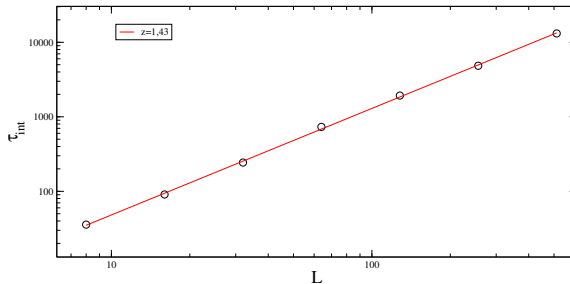


Figura 3.9: Gráfico log-log de τ em função de L para a sequência Paper-folding com $q = 6$ e $r = 0,1$.

tar o tempo de termalização do sistema concatenamos as séries de forma a obter uma única série com 15 bilhões de passos de Wolff. A única desvantagem deste método é que para cada uma das 20 séries foi necessário descartar o tempo de termalização. Este procedimento foi utilizado nas simulações de todas as sequências nas quais $L > 1000$.

Na fig. 3.10 apresentamos os gráficos log-log da magnetização (a) e da susceptibilidade (b) para as 3 sequências estudadas para $q = 6$ e $r = 0,1$, em função de pL . Como podemos ver na figura, fica claro a diferença de comportamento entre as sequências relevantes e irrelevantes. A partir de $L = 128$ a sequência TM tem uma inflexão na curva. Esta inflexão é a assinatura de que, para esta sequência, o carácter de transição de primeira ordem está se sobrepondo à perturbação aperiódica. Este padrão se repete independentemente do valor de q e r e, por isso, não apresentamos os gráficos para outros valores. Esta é uma confirmação da diferença de comportamento quando introduzimos sequências relevantes e irrelevantes.

Na tabela 3.4 apresentamos uma síntese das relações dos expoentes obtidos para as duas sequências relevantes. O erro apresentado nos nossos dados é o erro referente ao desvio padrão do ajuste levando-se em conta os erros de cada ponto. Os resultados obtidos por Berche e colaboradores. (Chatelain, Berche e Berche 1999) para Paper-Folding são $\beta/\nu = 0,49(1)$ e $\gamma/\nu = 1,01(1)$ e para Three-Folding são $\beta/\nu = 0,44(2)$ e $\gamma/\nu = 1,09(3)$, ambas simuladas em $r = 10$ o que é equivalente ao nosso $r = 0.1$. Vale ressaltar que, no referido trabalho, os ajustes feitos para Paper-Folding levam em conta simulações com $pL < 32$ e que para esses pontos a sequência não é autodual.

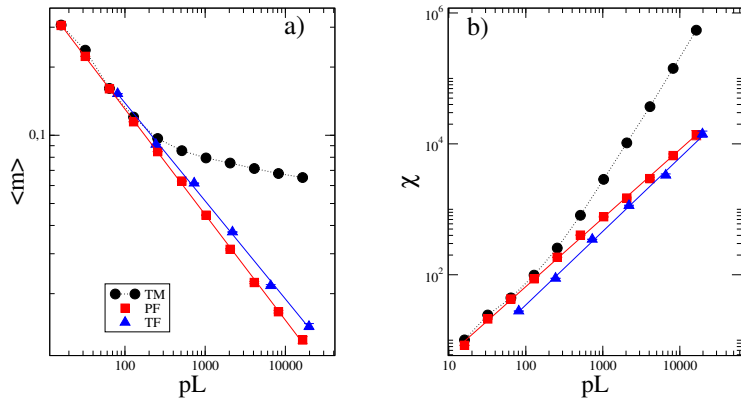


Figura 3.10: Gráfico log-log da a) magnetização e b) susceptibilidade em função de pL para as sequência Thue-Morse (TM), Paper-folding (PF) e Three-folding (TF), com $q = 6$ e $r = 0, 1$. As linhas cheias correspondem aos ajustes do tipo lei de potência e a linha pontilhada apenas conecta os pontos da sequência TM.

Como podemos ver, o nosso resultado para $q = 8$ da sequência PF é o mesmo, levando em conta as barras de erro, do resultado obtido por Berche e colaboradores. Isso nos garante que não há problema no nosso código e, portanto, podemos confiar no resultado para os outros valores de q , já que este é apenas um parâmetro introduzido no código. Um dos argumentos apresentados em favor da mudança da classe de universalidade das sequências relevantes foi o ajuste da grandeza termodinâmica em função de $1/L_{min}$. Este procedimento consiste em fazer o ajuste levando em conta todos os tamanhos de rede L e depois remover o menor valor de L e repetir isso até que se fique com apenas com os 3 maiores tamanho de rede simulados. O menor valor de L da sequência resultante é o L_{min} .

Na figura 3.11 a) apresentamos a mesma figura apresentada na referência (Chatelain, Berche e Berche 1999) para as três sequências, agora simuladas com $q = 6$ e $r = 0, 1$. Como podemos ver, o resultado é qualitativamente igual ao obtido por Berche e colaboradores, com β/ν indo a 0 (zero) para a sequência irrelevante (TM) e indo para $\sim 0,5$ para as duas sequências relevantes (PF e TF). Contudo, quando ampliamos o gráfico em torno dos expoentes das sequências relevantes (fig. 3.11 b)

Sequência	q	r	β/v	γ/v	$2\frac{\beta}{v} + \frac{\gamma}{v}$
Three-Folding	6	$r = 0.5$	0.395(8)	1.20(2)	1.99(3)
	6	$r = 0.25$	0.416(6)	1.16(2)	1.99(3)
	6	$r = 0.1$	0.433(7)	1.13(2)	2.00(3)
	6	$r = 0.01$	0.45(1)	1.07(2)	1.97(3)
	15	$r = 0.1$	0.47(3)	1.00(5)	1.94(8)
Paper-Folding	6	$r = 0.25$	0.455(4)	1.07(1)	1.98(2)
	6	$r = 0.1$	0.466(4)	1.033(8)	1.97(2)
	6	$r = 0.067$	0.471(5)	1.036(7)	1.98(2)
	6	$r = 0.05$	0.471(4)	1.026(7)	1.97(2)
	6	$r = 0.01$	0.480(6)	1.02(2)	1.98(3)
	6	$r = 0.001$	0.467(6)	1.05(1)	1.98(2)
	8	$r = 0.1$	0.482(4)	0.99(1)	1.95(2)
	15	$r = 0.1$	0.502(7)	0.95(2)	1.95(3)
	15	$r = 0.05$	0.516(9)	0.91(3)	1.94(4)
	15	$r = 0.01$	0.505(9)	0.93(2)	1.94(3)
	15	$r = 0.001$	0.49(1)	0.97(2)	1.95(3)

Tabela 3.4: Relação entre os expoentes críticos para as duas sequências relevantes. Para a sequência Paper-Folding só foram levados em conta os valores de $pL > 16$. O número em parêntese representa o erro na última casa.

e c)) vemos que há um comportamento anômalo dos expoentes. A cada valor de pL_{min} , a partir de um certo valor de pL , o ajuste do expoente começa a ter uma grande variação no seu valor ($\sim 10\%$). Para a sequência TM essa mudança é nítida mas não esperávamos tal mudança para as sequências relevantes. Para tentar entender este comportamento utilizamos outro artifício que facilita observar qual o verdadeiro comportamento das grandezas termodinâmicas na região crítica.

Calculamos as relações dos expoentes de interesse utilizando três valores consecutivos de pL e repetimos o procedimento utilizando todos os conjuntos possíveis. Por exemplo, $pL(32) = 32 \sim 128$ para o primeiro ajuste da sequência PF e $pL(64) = 64 \sim 256$ para o segundo ponto e assim sucessivamente até que sobrem os três últimos valores de pL simulados. Assim, conseguimos observar qual o comportamento da magnetização e da susceptibilidade com o aumento do tamanho de rede. Conforme apresentado na tabela 3.2, no sistema homogêneo as

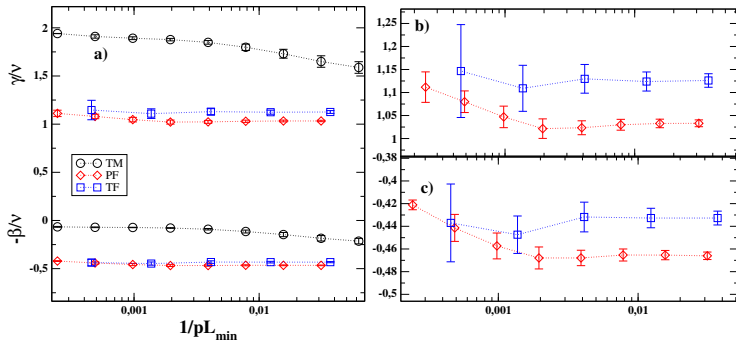


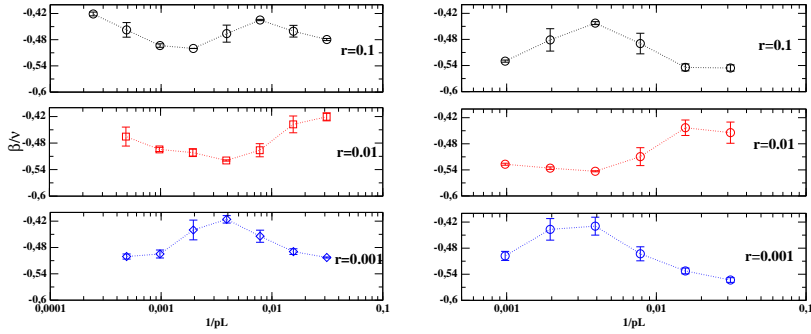
Figura 3.11: Gráfico semi-log das relações dos expoentes críticos em função de $1/pL_{\min}$ (a) para as 3 sequências estudadas com $q = 6$ e $r = 0, 1$. Os gráficos (b) e (c) são ampliações sobre os expoentes γ/v e β/v , respectivamente.

grandezas termodinâmicas variam de acordo com uma lei de potência de pL . Portanto, este ajuste a cada 3 valores de pL deveria fornecer praticamente o mesmo resultado, independente de quais valores de pL utilizados ou, no mínimo, indicar uma tendência monotônica. Este método foi usado por Picco (Picco 1998) para estudar o comportamento crítico do modelo de Potts de 8 estados com desordens aleatórias. Com este método deveria ser possível ver a partir de qual valor de pL o valor calculado se tornou constante e assim decidir qual o valor do expoente crítico.

Nas figuras 3.12 (expoentes β/v) e 3.13 (expoentes γ/v) apresentamos os gráficos, utilizando o método discutido acima, para a sequência Paper-Folding com $q = 6$ e 15. Como podemos ver ambos os expoentes apresentam um comportamento log-periódico:

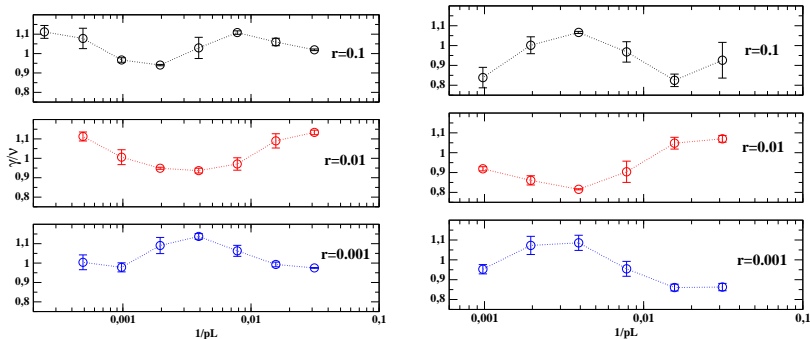
$$\Theta(L) = \Theta + A \cos(b \log(L) + c) \quad (3.21)$$

onde Θ corresponde ao valor central dos expoentes β/v ou γ/v . As figuras sugerem que a oscilação ocorre em torno do valor real do expoente crítico para uma dada sequência. Este comportamento é observado também para a sequência Three-Folding. Devido à escassez de dados (unido ao fato de que não conseguimos observar nem dois períodos de oscilação), não é possível fazer uma análise quantitativa, a partir dos



(a) Sequência Paper-Folding com $q = 6$. (b) Sequência Paper-Folding com $q = 15$.

Figura 3.12: Gráficos da relação dos expoentes β/v em função de $1/pL$ para a sequência Paper-Folding com $r = 0, 1, 0,01$ e $0,001$, variando de cima para baixo e com dois valores de q . Em todos os gráficos as escalas nos eixos x e y são as mesmas.



(a) Sequência Paper-Folding com $q = 6$. (b) Sequência Paper-Folding com $q = 15$.

Figura 3.13: Gráficos da relação dos expoentes γ/v em função de $1/pL$ para a sequência Paper-Folding com $r = 0, 1, 0,01$ e $0,001$, variando de cima para baixo e com dois valores de q . Em todos os gráficos as escalas nos eixos x e y são as mesmas.

gráficos acima, dos valores dos expoentes. Analisando qualitativamente as figuras podemos concluir que o parâmetro r apenas altera a fase do sistema e não altera o valor central dos expoentes, pelo menos no intervalo estudado.

A coluna da direita da fig. 3.12 corresponde a $q = 15$: é fácil de ver que a amplitude de oscilação para $q = 15$ é maior que para $q = 6$. Além disso, para β/v , o máximo da oscilação tem aproximadamente o mesmo valor ($\sim 0,42$) para os dois valores de q . Contudo, os mínimos são diferentes: $0,51$ para $q = 6$ e $0,54$ para $q = 15$. Portanto, podemos inferir que o valor central, ou seja, a relação β/v de $q = 6$ é um pouco menor que o de $q = 15$. Como esperado, o comportamento oposto é observado para a razão γ/v . Esta dependência da classe de universalidade com q também é observada para desordens aleatórias (Cardy e Jacobsen 1997, Jacobsen e Cardy 1998).

Como foi observado por Picco (Picco 1998), a introdução da perturbação deve apresentar dois “*crossovers*”. Um para $r = 1$ (sistema homogêneo) e outro para $r \rightarrow 0$ ou ∞ . Neste caso e para o nosso modelo o sistema deve apresentar o comportamento crítico do sistema unidimensional. Em seu trabalho, com interações aleatórias, ele observou que na região entre $8 \leq r \leq 20$ os expoentes críticos independiam de r . Neste trabalho variamos entre $0,001 \leq r \leq 0,1$ ¹ e em todos os valores de r para o mesmo q o sistema apresentou a mesma amplitude e o mesmo valor central, ou seja, expoente crítico.

Como podemos ver na tabela 3.4 a relação $2\beta/v + \gamma/v = 2$ só é respeitada para $q = 6$ e 8 ; para $q = 15$ esta relação só é respeitada se tomarmos o erro como 2σ (σ é o desvio padrão). Provavelmente, isso se deve ao fato de não termos nem um período da oscilação. É fácil ver que os valores dos expoentes da tabela 3.1 podem ser calculados com o ajuste de uma reta nos gráficos da fig 3.12: o coeficiente linear desta reta deve ser aproximadamente o valor central da oscilação, ficando mais próximo quanto maior for o número de períodos medidos. Como podemos ver na figura 3.12, para $q = 15$ não foi possível obter nem mesmo um período completo, comprometendo o nosso ajuste e, portanto, nos fornecendo valores imprecisos para os expoentes críticos (como temos um tempo limitado para realizar este trabalho não foi possível melhorar nossos dados, pretendemos futuramente melhorá-los e estudar valores maiores de q).

¹Lembramos que nos sistemas autoduais, como o nosso e o utilizado por Picco, utilizar r ou $1/r$ fornece o mesmo comportamento crítico.

Como observamos que a amplitude da oscilação não depende de r e que este parâmetro apenas altera a fase da oscilação, pode-se usar o seguinte procedimento para ter uma estimativa dos expoentes: se somarmos as frações de períodos dos vários r temos vários períodos; assim, para obter o expoente crítico para cada valor de q , calculamos a média de $\Theta(L)$ para todos os valores de r . Como vimos, para todos os valores de r as oscilações ocorrem em torno de um mesmo valor, que é o expoente crítico do sistema. Esta é, neste momento, a melhor maneira de estimar os expoentes críticos (valor central da oscilação). A síntese do resultado obtido através deste método é apresentada na tabela 3.5. Como podemos ver, através deste método é possível inferir que os expoentes de $q = 6$ são diferentes de $q = 15$. Esta conclusão é reforçada pelo comportamento das amplitudes das oscilações (Figs. 3.12 e 3.13).

Sequência	q	β/ν	γ/ν	$2\frac{\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu}$
Three-Folding	6	0,43(4)	1.12(5)	1.98(9)
Paper-Folding	6	0,47(3)	1,04(5)	1,98(8)
	15	0,50(4)	0,94(8)	1,94(12)

Tabela 3.5: Expoentes críticos para as duas sequências relevantes, calculados através da média de $\Theta(L)$ para todos os valores de r simulados. Os números em parênteses representam o erro na última casa.

3.7 Conclusões e perspectivas

Podemos concluir que, para as sequências estudadas, o critério de Harris-Luck é respeitado para transições de primeira ordem. A sequência Thue-Morse (irrelevante), para valores de $pL < 256$, apresenta um comportamento característico das transições contínuas mas, com o aumento do tamanho de rede, a transição de primeira torna-se evidente (ver fig. 3.10). Já as duas sequências relevantes, Paper-Folding e Three-Folding, apresentam apenas transições contínuas, seja em $q = 6$ ou 15. O método de Lee-Kosterlitz mostra indubitavelmente que estamos observando uma transição contínua e não um fenômeno parecido com o observado na sequência Thue-Morse.

A outra questão a ser respondida era determinar a nova classe de universalidade e se esta nova classe de universalidade era dependente

do número de estados q . Conseguimos fazer uma estimativa inicial das relações dos expoentes críticos β/ν e γ/ν (ver tab. 3.5). Para que pudéssemos determinar com mais precisão a nova classe de universalidade seria necessário simular redes de até $L \approx 500000$, para que possamos ter ao menos dois períodos de oscilação e assim fazer um ajuste confiável.

Ao aplicarmos o método de escala de tamanho finito (FSS), observamos a presença de uma oscilação log-periódica da magnetização e da suscetibilidade como função do tamanho de rede (L), como esperado (Niemeijer e Leeuwen 1976). O método tradicional de FSS não permitiu um ajuste preciso dos expoentes críticos e, portanto, desenvolvemos uma metodologia para estimá-los. Mesmo aplicando esta metodologia nossos resultados não permitem determinar de forma definitiva se a classe de universalidade é dependente do parâmetro q . Trabalhos com desordens aleatórias mostram que os expoentes críticos dependem de q de forma logaritmica, ou seja, $X \sim \ln q$, onde X é um expoente crítico. Essa variação é muito pequena quando comparada com as nossas barras de erro. Apesar dos expoentes calculados não permitirem uma conclusão em favor da dependência da nova classe de universalidade analisando as oscilações log-periódicas fica evidente esta dependência.

Temos como perspectiva utilizar o método de matriz de transferência para estudar este mesmo sistema e assim determinar a classe de universalidade. Uma questão que omitimos até o momento foi o comportamento de outras grandezas termodinâmicas, tais como calor específico, cumulante de Binder e derivadas logaritmicas da magnetização. Observamos que o calor específico apresenta dois máximos, bem como as derivadas logaritmicas da magnetização. Como a magnetização e a susceptibilidade apresentavam o mesmo comportamento do sistema puro optamos por nos concentrar apenas nessas duas grandezas e deixar as outras para um estudo futuro.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aizenman e Wehr 1989 AIZENMAN, M.; WEHR, J. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. *Physical review letters*, APS, v. 62, n. 21, p. 2503–2506, 1989.
- Baillie e Coddington 1991 BAILLIE, C.; CODDINGTON, P. Comparison of cluster algorithms for two-dimensional Potts models. *Physical Review B*, APS, v. 43, n. 13, p. 10617–10621, 1991.
- Berche, Chatelain e Berche 1998 BERCHE, P.; CHATELAIN, C.; BERCHE, B. Aperiodicity-Induced Second-Order Phase Transition in the 8-State Potts Model. *Physical Review Letters*, APS, v. 80, n. 2, p. 297–300, 1998.
- Branco e Machado 1993 BRANCO, N.; MACHADO, K. Two-and three-dimensional site-bond-correlated percolation. *Physical Review B*, APS, v. 47, n. 1, p. 493–496, 1993.
- Branco, Queiroz e Santos 1988 BRANCO, N.; QUEIROZ, S.; SANTOS, R. Phase diagrams for correlated dilution problems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 21, p. 2463, 1988.
- Branco, Queiroz e Santos 1988 BRANCO, N.; QUEIROZ, S. de; SANTOS, R. D. Ising model with short-range correlated dilution. *Physical Review B*, APS, v. 38, n. 1, p. 946–949, 1988.
- Branco, Queiroz e Santos 1990 BRANCO, N.; QUEIROZ, S. de; SANTOS, R. D. Heisenberg and Ising spins in three dimensions with site-bond-correlated dilution. *Physical Review B*, APS, v. 42, n. 1, p. 458–464, 1990.
- Butera e Pernici 2008 BUTERA, P.; PERNICI, M. High-accuracy estimates of the critical parameters for the XY model on the square and the triangular lattices using the high-temperature expansions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, 2008.
- Cardy e Jacobsen 1997 CARDY, J.; JACOBSEN, J. Critical behavior of random-bond Potts models. *Physical Review Letters*, APS, v. 79, n. 21, p. 4063–4066, 1997.

- Challa, Landau e Binder 1986 CHALLA, M.; LANDAU, D.; BINDER, K. Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. *Physical Review B*, APS, v. 34, n. 3, p. 1841–1852, 1986.
- Chatelain, Berche e Berche 1999 CHATELAIN, C.; BERCHE, P.; BERCHE, B. Second-order phase transition induced by deterministic fluctuations in aperiodic eight-state Potts models. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, Springer, v. 7, n. 3, p. 439–449, 1999.
- Chen, Ferrenberg e Landau 1995 CHEN, S.; FERRENBURG, A.; LANDAU, D. Monte Carlo simulation of phase transitions in a two-dimensional random-bond Potts model. *Physical Review E*, APS, v. 52, n. 2, p. 1377–1386, 1995.
- Coddington e Baillie 1992 CODDINGTON, P.; BAILLIE, C. Empirical relations between static and dynamic exponents for Ising model cluster algorithms. *Physical review letters*, APS, v. 68, n. 7, p. 962–965, 1992.
- Crawford et al. 2006 CRAWFORD, D. et al. Gnuplot: An interactive plotting program. *Disponível em* <<http://www.gnuplot.info/docs/gnuplot.html>>. Acesso: Set, 2006.
- DIAZ 2009 DIAZ, I. J. L. *Propriedades magnéticas e comportamento crítico de ligas binárias $Fe_{1-x}Ru_x$* . [S.l.]: Universidade Federal de Santa Catarina, 2009.
- Edwards e Sokal 1989 EDWARDS, R.; SOKAL, A. Dynamic critical behavior of Wolff’s collective-mode Monte Carlo algorithm for the two-dimensional O (n) nonlinear σ model. *Physical Review D*, APS, v. 40, n. 4, p. 1374–1377, 1989.
- Faria 2006 FARIA, M. S. *Efeitos de aperiodicidade no comportamento crítico de modelos magnéticos na rede de Bethe*. [S.l.]: Universidade Federal de Santa Catarina, 2006.
- Fisher e Berker 1982 FISHER, M. E.; BERKER, A. N. Scaling for first-order phase transitions in thermodynamic and finite systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 26, n. 5, p. 2507–2513, Sep 1982.

- Harris 1974 HARRIS, A. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 7, p. 1671, 1974.
- Hui e Berker 1989 HUI, K.; BERKER, A. Random-field mechanism in random-bond multicritical systems. *Physical review letters*, APS, v. 62, n. 21, p. 2507–2510, 1989.
- Jacobsen e Cardy 1998 JACOBSEN, J. L.; CARDY, J. Critical behaviour of random-bond Potts models: a transfer matrix study. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 515, n. 3, p. 701–742, 1998.
- Jr e Davison 1990 JR, J. W.; DAVISON, C. Review of the Capabilities and Properties of Electroless Plated Thin Film Media for Rigid Memory Disks. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 137, p. 3260, 1990.
- Landau e Binder 2000 LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, United Kingdom, 2000. ISBN 0521653142.
- Lee e Kosterlitz 1990 LEE, J.; KOSTERLITZ, J. New numerical method to study phase transitions. *Physical Review Letters*, APS, v. 65, n. 2, p. 137–140, 1990.
- Luck 1993 LUCK, J. A classification of critical phenomena on quasicrystals and other aperiodic structures. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 24, p. 359, 1993.
- Newman e Barkema 1999 NEWMAN, M. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. [S.l.]: Oxford University Press, USA, 1999. ISBN 198517963.
- Niedermayer 1988 NIEDERMAYER, F. General cluster updating method for Monte Carlo simulations. *Physical review letters*, APS, v. 61, n. 18, p. 2026–2029, 1988.
- Niemeijer e Leeuwen 1976 NIEMEIJER, T.; LEEUWEN, J. M. J. van. *Phase Transitions and Critical Phenomena*. [S.l.]: Academic, New York, USA, 1976.
- Nienhuis, Riedel e Schick 1981 NIENHUIS, B.; RIEDEL, E.; SCHICK, M. q-state Potts model in general dimension. *Physical Review B*, APS, v. 23, n. 11, p. 6055–6060, 1981.

- Nightingale e Blöte 1996 NIGHTINGALE, M.; BLÖTE, H. Dynamic exponent of the two-dimensional ising model and monte carlo computation of the subdominant eigenvalue of the stochastic matrix. *Physical review letters*, APS, v. 76, n. 24, p. 4548–4551, 1996.
- Oliveira 1991 OLIVEIRA, P. M. C. de. *Computing Boolean Statistical Models*. [S.l.]: World Scientific, London, UK, 1991.
- Peczak e Landau 1989 PECZAK, P.; LANDAU, D. Monte Carlo study of finite-size effects at a weakly first-order phase transition. *Physical Review B*, APS, v. 39, n. 16, p. 11932–11942, 1989.
- Picco 1998 PICCO, M. A Study of Cross-Over Effects For The 2D Random Bond Potts Model. *Arxiv preprint cond-mat/9802092*, 1998.
- Potts e Domb 1952 POTTS, R.; DOMB, C. Some generalized order-disorder transformations. In: *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. [S.l.: s.n.], 1952. v. 48, p. 106.
- Reis, Queiroz e Santos 1996 REIS, F. D. A. A.; QUEIROZ, S. L. A. de; SANTOS, R. R. dos. *Phys. Rev. B*, v. 54, p. R9616, 1996.
- Ross 1994 ROSS, C. Electrodeposited multilayer thin films. *Annual Review of Materials Science*, Annual Reviews, v. 24, n. 1, p. 159–188, 1994.
- Saleur e Duplantier 1987 SALEUR, H.; DUPLANTIER, B. Exact determination of the percolation hull exponent in two dimensions. *Physical review letters*, APS, v. 58, n. 22, p. 2325–2328, 1987.
- Savit 1980 SAVIT, R. Duality in field theory and statistical systems. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 52, n. 2, p. 453–487, 1980.
- Shchukin e Bimberg 1999 SHCHUKIN, V.; BIMBERG, D. Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 71, n. 4, p. 1125–1171, 1999.
- Swendsen e Wang 1987 SWENDSEN, R.; WANG, J. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Physical Review Letters*, APS, v. 58, n. 2, p. 86–88, 1987.

- Wang e Landau 2001 WANG, F.; LANDAU, D. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. *Physical Review Letters*, APS, v. 86, n. 10, p. 2050–2053, 2001.
- Wansleben e Landau 1987 WANSLEBEN, S.; LANDAU, D. Dynamical critical exponent of the 3D Ising model. *Journal of Applied Physics*, v. 61, p. 3968, 1987.
- Weber e Minnhagen 1988 WEBER, H.; MINNHAGEN, P. Monte Carlo determination of the critical temperature for the two-dimensional XY model. *Physical Review B*, APS, v. 37, n. 10, p. 5986–5989, 1988.
- Weinrib 1984 WEINRIB, A. Long-range correlated percolation. *Physical Review B*, APS, v. 29, n. 1, p. 387–395, 1984.
- Wolff 1989 WOLFF, U. Collective Monte Carlo updating in a high precision study of the xy model. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 322, n. 3, p. 759–774, 1989.
- Wu 1982 WU, F. The Potts model. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 54, n. 1, p. 235–268, 1982.

Apêndice A - Algoritmo de Niedermayer para o modelo XY

O Hamiltoniano do modelo XY é definido como:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (1)$$

onde J é a constante de acoplamento e \vec{s}_i é o estado do sítio i , representado por um vetor unitário que pode assumir qualquer direção no plano xy . A energia de ligação entre os dois sítios é definida como um produto escalar entre os vetores de cada sítio.

Para começar a formação da ilha sorteamos uma direção \hat{n} e um sítio \vec{s}_i . Os sítios vizinhos a \vec{s}_i são adicionados com probabilidade:

$$P_{add} = \begin{cases} 1 - e^{-\beta J(\vec{s}_i \cdot \hat{n})(\vec{s}_j \cdot \hat{n})(1+E_0)}, & \text{se } E_{ij} < E_0, \\ 0, & \text{se } E_{ij} \geq E_0, \end{cases} \quad (2)$$

onde $E_{ij} = -J\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$. Esta probabilidade só é válida para $-1 \leq E_0 \leq +1$, onde somente os sítios que tiverem componente na direção \hat{n} com o mesmo sinal que a componente de \vec{s}_i poderão ser adicionados à ilha. Após a formação da ilha todos os sítios sofrem uma mudança de direção. A nova direção é determinada através de uma reflexão com respeito ao eixo perpendicular a \hat{n} conforme é mostrado na Fig. 1. A nova direção (θ'_i) de cada sítio é definida como:

$$\theta'_i = -\theta_i + 2\theta_n - \pi \quad (3)$$

onde θ_i é o ângulo que o vetor faz com um eixo arbitrário x antes da modificação e θ_n é o ângulo que o vetor \hat{n} faz com o mesmo eixo.

Diferentemente do que se faz no modelo de Ising a nova energia do sistema deve ser calculada sítio a sítio, pois não existe uma maneira rápida para calcular a nova energia do sistema. Após todos os sítios da ilha serem “virados” a nova energia do sistema é calculada. Esta nova configuração é aceita de acordo com:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\frac{\Delta E}{2} \beta(1-E_0)}, & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{se } \Delta E \leq 0 \end{cases} \quad (4)$$

onde ΔE é a diferença de energia do sistema. Se tomarmos $E_0 = 1$ o algoritmo também se comporta como o algoritmo de Wolff. Se a nova

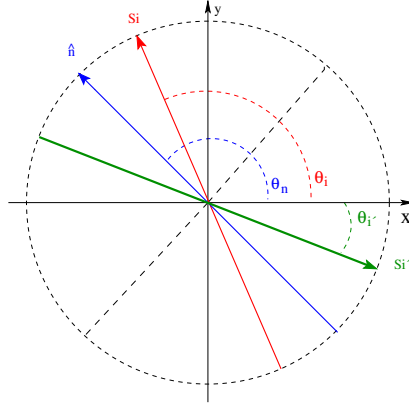


Figura 1: Exemplo de como é feita a mudança de direção de um determinado sítio. \vec{s}_i é o estado antigo do spin i , \vec{s}_i' é seu novo estado e \hat{n} é a direção sorteada

configuração não for aceita todos os sítios retornam para o seu estado original.

Prova do Balanço Detalhado

Agora iremos provar que as equações 2 e 4 satisfazem o balanço detalhado para $-1 \leq E_0 \leq +1$. Primeiramente vamos definir o vetor \vec{s}_i como:

$$\vec{s}_i = a_i \hat{n}_{\parallel} + b_i \hat{n}_{\perp} \quad (5)$$

onde a_i e b_i são as componentes paralela e perpendicular ao vetor arbitrário \hat{n} , respectivamente. Como descrito anteriormente, após a ilha ser formada, todos os sítios sofrem uma reflexão em relação ao eixo perpendicular a \hat{n} . Isso significa que apenas as componentes a são modificadas ($a_i' = -a_i$). Fica fácil ver que a variação de energia (ΔE) entre uma configuração com um dado sítio “virado” i' e uma configuração na qual este mesmo sítio ficou no estado i é dada por:

$$\Delta E = \pm 2J a_i a_j \quad (6)$$

sendo positiva caso a ligação seja insatisfeita e negativa se for satisfeita, após a mudança de \vec{s}_i .

Como todos os sítios pertencentes a ilha são virados em relação ao mesmo eixo (perpendicular a \hat{n}) a energia da ilha não varia. Portanto, a variação de energia do sistema é devida à fronteira da ilha com o resto do sistema. Assim temos que:

$$\Delta E = 2J \left(\sum_{\langle ij \rangle} a_i a_j - \sum_{\langle kl \rangle} a_k a_l \right) \quad (7)$$

onde ij e kl denotam as ligações insatisfeitas e satisfeitas ao se virar a ilha, respectivamente.

A probabilidade de construir uma ilha está relacionada à probabilidade de adição de um sítio à ilha através de:

$$g(\nu \rightarrow \mu) \propto \prod_{\langle ij \rangle} (1 - Padd_{ij}) \quad (8)$$

onde $Padd_{ij}$ é a probabilidade de um sítio j ser adicionado à ilha do sítio i . A probabilidade da mesma ilha voltar para o estado original pode ser definida como:

$$g(\mu \rightarrow \nu) \propto \prod_{\langle kl \rangle} (1 - Padd_{kl}). \quad (9)$$

Para que o algoritmo respeite o balanço detalhado ele precisa respeitar a relação:

$$\frac{A(\nu \rightarrow \mu) \cdot g(\nu \rightarrow \mu)}{A(\nu \rightarrow \nu) \cdot g(\mu \rightarrow \nu)} = e^{-\beta \Delta E} \quad (10)$$

onde A é a taxa de aceite da transição entre os estados e $\beta = 1/k_B T$. Substituindo 7, 8 e 9 em 10 temos que:

$$\frac{A(\nu \rightarrow \mu)}{A(\nu \rightarrow \nu)} = \frac{\prod_{\langle kl \rangle} [(1 - Padd_{kl}) \cdot e^{2Ka_k a_l}]}{\prod_{\langle ij \rangle} [(1 - Padd_{ij}) \cdot e^{2Ka_i a_j}]} \quad (11)$$

onde $K = \beta J$. Definindo a $Padd$ como:

$$Padd_{ij} = 1 - e^{-Ka_i a_j (1 + E_0)} \quad (12)$$

onde E_0 é adimensional, a Eq. 11 é satisfeita. Podemos ver que, para

$E_0 = 1$, a *Padd* é igual a do algoritmo de Wolff aplicado ao modelo XY. Substituindo 12 em 11, obtemos:

$$\frac{A(\mathbf{v} \rightarrow \boldsymbol{\mu})}{A(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v})} = e^{-\frac{\Delta E}{2} \beta (1 - E_0)}. \quad (13)$$

Assim, podemos ver que as equações 12 e 13 satisfazem 10. Portanto, provamos que o algoritmo de Niedermayer satisfaz o balanço detalhado.

Outro requisito para que um algoritmo tenha validade é que ele seja ergódico. Ou seja, permita que todas as configurações possíveis do sistema possam ser geradas. Provar matematicamente que um algoritmo é ergódico é muito complicado. Contudo, pode-se argumentar razoavelmente bem a favor da sua ergodicidade. No caso do algoritmo de Niedermayer, sabemos que qualquer configuração é acessível pois sempre podemos sortear qualquer vetor \hat{n} e adicionarmos apenas um sítio à ilha, de forma a gerar a configuração desejada após um número finito de passos.